

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA AMBIENTAL

EDILSON LUIZ DO NASCIMENTO

Suspensão e deposição de material
particulado emitido por pilhas de
estocagem de granulados: uma
abordagem numérica empregando LES

VITÓRIA
2014

EDILSON LUIZ DO NASCIMENTO

Suspensão e deposição de material particulado emitido por pilhas de estocagem de granulados: uma abordagem numérica empregando LES

Tese submetida ao Programa de Pós- Graduação em Engenharia Ambiental do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para o grau de Doutor em Engenharia Ambiental.

Orientador: Prof^a. Jane Meri Santos

Coorientador: Bruno Furieri

Dados Internacionais de Catalogação-na-publicação (CIP)

(Biblioteca Setorial Tecnológica,

Universidade Federal do Espírito Santo, ES, Brasil)

Nascimento, Edilson Luiz do, 1965-

N244s Suspensão e deposição de material particulado emitido por pilhas de estocagem de granulados : uma abordagem numérica empregando LES / Edilson Luiz do Nascimento. – 2014.

182 f. : il.

Orientador: Jane Meri Santos.

Coorientador: Bruno Furieri.

Tese (Doutorado em Engenharia Ambiental) – Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico.

1. Lagrange, Equações. 2. Simulação de grandes vórtices (LES). 3. Fluidodinâmica computacional. 4. Materiais granulados. 5. Simulação numérica. 6. Material particulado. I. Santos, Jane Meri. II. Furieri, Bruno. III. Universidade Federal do Espírito Santo. Centro Tecnológico. IV. Título.

CDU: 628

EDILSON LUIZ DO NASCIMENTO

Suspensão e deposição de material particulado emitido por pilhas de estocagem de granulados: uma abordagem numérica empregando LES

Tese apresentada ao programa de Pós-graduação em Engenharia Ambiental da
Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do Grau
de Doutor em Engenharia Ambiental, área de concentração Poluição do Ar.

Vitória, 08 de agosto de 2014.

COMISSÃO EXAMINADORA

Jane Meri Santos
Orientadora – DEA/CT/UFES

Bruno Furieri
Coorientador – DEA/CT/UFES

Antonio Gledson Oliveira Goulart
Examinador externo – IMEF/UFRG

Murilo Pereira de Almeida
Examinador externo – PPF/UFC

Edmilson Costa Teixeira
Examinador interno – DEA/CT/UFES

Davidson Martins Moreira
Examinador interno – DEA/CT/UFES

AGRADECIMENTOS

A Deus.

Aos meus familiares, em especial minha mãe, que sempre me incentivou a estudar e rezaram muito para que esse momento enfim chegasse.

A minha esposa Karla, que se fez presente nos momentos difíceis da árdua caminhada. Você é meu amor, minha vida e minha razão de viver.

Aos meus filhos Rodolfo e Sofia, que mesmo nas suas inocências sempre me incentivaram em todos os momentos.

A minha professora Gersonita, da 1ª série, de onde tudo começou e não me esqueço dos seus primeiros ensinamentos, jamais.

À minha orientadora, Jane. Para você não existem palavras que possam expressar o sentimento de gratidão, amizade, senso de profissionalismo, e, a seu modo, paciência incondicional. Mas não custa tentar: obrigado!

Neyval, com quem já tinha trabalhado no mestrado, meus sinceros agradecimentos pelas valiosas intervenções durante todo o árduo trajeto que acompanhou de perto.

Taciana, a única que conheço que trabalha 20 horas em regime de dedicação exclusiva! Tudo que acontecer com você de bom ainda é pouco, pela pessoa comprometida que é. Os meus mais sinceros agradecimentos pelo seu esforço, em ver esse trabalho terminado. Sei o quanto me apoiou, e as consequências serão uma amizade que não esquecerei jamais.

Bruno Furieri, meu parceiro de trabalho e conterrâneo de Linhares, você merece muito mais que um simples agradecimento e pode ter certeza, estará nos anais da minha história nessa instituição. BFF!

Enilene, você sabe muito bem o significado da amizade, companheirismo nos momentos de angústia e sabedoria nas dúvidas. Sabe que agradecimentos especiais são para pessoas especiais. Portanto, um obrigado especial para você.

Aos professores e apoiadores Antonio Frasson pelas valiosas contribuições na parte teórica, e Hans Jörg, pelo apoio incondicional na configuração dos computadores e softwares onde foram executadas as simulações.

Aos meus amigos de doutorado Nadir Salvador, Ayres Geraldo Loriato, Antonio de Paula, Maria Clara, Milena Machado, Rafael Sartim e Harerton, que sabem o que são os perrengues de um curso como esse, e não esmoreceram.

Não poderia deixar de agradecer aos nossos amigos Keusiane e Artur. Pelo apoio moral, espiritual e ombro amigo que deram ao longo desta caminhada, vocês estarão eternamente no coração da minha família.

A todos os colegas do NQualiar. À secretária Rosi, que sempre me ajudou, e aos professores do PPGEA.

Elisa, não me esqueci de você. A sua força me faz seguir adiante. Com a sua perseverança podemos montar quantos clusters precisarmos.

Não tenho como colocar os nomes de todos os que direta ou indiretamente colaboraram para que esse trabalho fosse concluído, mas sintam-se agradecidos.

RESUMO

A presença de material particulado (MP) na atmosfera pode causar danos diretos à saúde da população. O material particulado presente na atmosfera pode ter origem em diversos processos, entre eles siderúrgico, construção civil, exploração, beneficiamento, movimentação e estocagem de materiais fragmentados e ressuspensões do solo. As pilhas de estocagem de granulados são fontes difusas de MP cuja emissão ocorre devido à erosão eólica. Um parâmetro determinante para a ocorrência de erosão eólica é a velocidade de fricção, cujo valor limite quando ultrapassado causa a movimentação de partículas, podendo ocorrer suspensão, saltos ou rolamento do MP proveniente de pilhas de estocagem. A velocidade de fricção sobre as pilhas de estocagem podem ser determinadas por meio de simulações numéricas incorporando modelos de turbulência. Uma alternativa para modelagem da turbulência é a abordagem Euleriana com o uso do modelo denominado LES (*Large Eddy Simulation*) e lagrangiana para análise do movimento das partículas. No entanto, para que esta análise seja feita, é necessário um modelo de emissão da pilha de estocagem. Nesse contexto, foi utilizado o modelo de emissão USEPA para pilhas de estocagem. Esse trabalho investigou a suspensão e ressuspensão de MP emitidos por pilha de estocagem devido à erosão eólica e modelo de turbulência LES WALE para reproduzir o transporte de momentum próximo à superfície. Foi utilizado o modelo USEPA de emissão de partículas e abordagem lagrangiana de movimento das partículas erodidas da pilha. As contribuições desse trabalho incluíram análises de perfis e contornos de concentrações horizontais e verticais no entorno de pilhas por meio do modelo de turbulência LES WALE e modelagem de emissão USEPA modificado (adaptado), acoplado à modelagem de dispersão lagrangiana. Essa abordagem permitiu a determinação da quantidade de partículas emitidas da pilha de estocagem na mesma ordem de grandeza de pilhas reais. Também foi possível avaliar a suspensão, deposição e ressuspensão, por meio do acompanhamento das partículas no espaço e tempo. Foram necessários desenvolvimentos de softwares para a fase de acoplamento e pós-processamento. As validações foram efetuadas com experimentos em túneis de vento em leito de partículas e em pilhas, realizados por outros autores. Os resultados demonstraram que o modelo de turbulência LES WALE integrado ao modelo de emissão USEPA modificado se mostrou boa alternativa, uma vez que o erro relativo foi de 6% em média e a zona de recirculação foi bem representada, com erro de 1,5% no ponto de recolamento em comparações com experimentos em túnel de vento de outros autores. Foi verificado que os perfis de concentrações verticais estiveram nos patamares de 10^{-4} g/cm³ a 10^{-6} g/cm³ ao longo do domínio de estudo, condizentes com a faixa da ordem de grandeza do experimento em leito de partículas de outros autores. Houve 12 vezes mais partículas suspensas do que depositadas durante o tempo de simulação. A massa de partículas que saíram do domínio variou entre 10^{-2} g e 10^{-3} g, durante 5 segundos de simulação de escoamento concomitante com dispersão. As laterais da pilha de formato *oblong* foram as áreas da superfície da pilha que mais emitiram partículas.

Palavras-chave – Euler-Lagrange, LES WALE, simulação numérica, CFD, pilhas de estocagem, material particulado, emissão.

Lista de Figuras

Figura 3.1 – Forças que agem na partícula submetida a um gradiente de velocidade: Sustentação(F_l); Arraste(F_d); Adesão(F_a) e Gravidade (F_g). Adaptado de Descamps (2004).	33
Figura 3.2: Três modos de transporte das partículas devido ao efeito da erosão eólica: (a) suspensão, (b) salto e (c) rolamento. Adaptado de Duran <i>et al.</i> (2011).	34
Figura 3.3 - Critérios de erodibilidade das partículas. Fonte: TURPIN (2010)	38
Figura 3.4 – Configuração de colisão partícula-solo. Fonte: Adaptado de Tain (2006).	39
Figura 3.5 – a) Representação esquemática da decomposição do espectro de energia em escalas resolvidas e modeladas segundo LES; b) Representação esquemática da decomposição do espectro de energia em escalas resolvidas e modeladas segundo RANS.	46
Figura 3.6 – Representação esquemática da variação randômica da velocidade em torno da média. Fonte: Adaptado de Santos(2000).	47
Figura 3.7– Representação esquemática da camada limite, destacando a parede e o perfil de velocidade logarítmico. Fonte: Adaptado de JIANG e LAI (2009).	51
Figura 3.8 – Representação esquemática da parede com a relação entre o perfil de velocidade logarítmico. Fonte: Adaptado de: Nezu e Tominaga (2000) e Cebeci e Cousteix (2005, pag. 166).	53
Figura 3.9 – Deslocamento na zona de perfil logarítmico devido à parede rugosa. Fonte: Adaptado de Furieri (2012).	54
Figura 3.10 – Representação esquemática do escoamento ao redor de um prédio cúbico – vista do plano central. Fonte: Adaptado de Murakami (1993).	55
Figura 3.11 - Estruturas típicas do escoamento ao redor de um obstáculo cúbico – perspectiva tridimensional. Fonte: Adaptado de Hosker (1980).	57
Figura 3.12 - Simulação numérica do escoamento ao redor de uma pilha de estocagem perpendicular à direção principal do vento: Visualização da pressão estática na superfície e no entorno da pilha. Fonte: Adaptado de Turpin (2010).	57
Figura 3.13 – Trajetórias de partículas fluidas liberadas de posições anteriores ao obstáculo. Adaptado de Turpin (2010)	58
Figura 3.14 – Distribuição da velocidade normalizada u_{sur} de pilhas de estocagem (A) – Formato de cone; (B1) – Formato oval com topo plano (ambas com direção do vento 90°); (B2) – Formato oval com topo plano e direção do vento 20°; (B3) – Formato oval com topo plano e direção do vento 40°. Fonte: Adaptado de USEPA (2006b).	72
Figura 3.15 – Resultados obtidos em túneis de vento para velocidade de 8 m/s. Fonte: FURIERI (2012).	74
Figura 3.16 – Distribuição de Rosin-Rammler	78
Figura 3.17 – Configurações das pilhas estudadas: a) Oval; b) Cônica.	81
Figura 4.1 – Domínio da simulação com cortes em plano e superfície para detalhe da malha.	93
Figura 4.2 – (a) Malha acima da superfície da pilha no plano simétrico ($x=0$); (b) Malha no solo ($z=0$) em torno da pilha.	93
Figura 4.3 – Influência das partículas não erodíveis na evolução temporal do fluxo de massa emitida para velocidade de escoamento incidente de 8 m/s e 20% de partículas não erodíveis: a) Fluxo de massa emitido; b) Fotos de experimentos em túnel de vento. Fonte: Furieri (2012).	100
Figura 4.4 – Detalhe aumentado da Figura 4.3 (a) com a curva ajustada em função exponencial representando o decaimento temporal do fluxo de massa emitido.	101
Figura 4.5 – Fluxograma para injeção de partículas na superfície da pilha	102
Figura 4.6 – Diagrama do experimento em túnel de vento. Fonte: Adaptado de Zhang, Wang e Lee (2007)	107

Figura 4.7 - a) Perfil de velocidade média do vento em função da altura da ABL; b) Campo de velocidade instantânea para partículas em salto; c) Concentração de partículas em função da altura;	108
Figura 4.8 – Diagrama esquemático da área dividida em <i>strips</i> para cálculo da concentração e velocidade.	109
Figura 4.9 – Algoritmo de pós-processamento para cálculo da concentração de partículas.	109
Figura 4.10 – Túnel de vento utilizado para simulação escoamento em pilhas de estocagem. Fonte: Turpin (2010).	110
Figura 4.11 – Perfis experimentais médios e turbulentos na entrada da zona de medição do túnel de vento.	111
Figura 4.12 – Planos de medidas paralelos ao escoamento e perpendiculares e paralelos à superfície. Fonte: Adaptado de Turpin (2010).	112
Figura 4.13 – Esquema de iluminação das partículas inseridas no domínio da seção de teste do túnel de vento.	112
Figura 4.14 – Algoritmos para cálculo de concentração instantânea: (a) por faixa granulométrica, plano horizontal e vertical . (b) Concentração no domínio entre dois intervalos de tempo.	114
Figura 4.15 – Mapa conceitual representando a metodologia utilizada.	116
Figura 5.1 – Perfil de velocidade média em função da altura. A linha horizontal tracejada representa a espessura da camada limite.	119
Figura 5.2 – Intensidade turbulenta em função da altura na entrada do domínio.	120
Figura 5.3 – Concentração de partículas em função da altura do domínio da simulação	122
Figura 5.4 (a) – Distribuição das partículas em um determinado instante obtida no presente trabalho; (b) – Representação experimental da movimentação das partículas.	123
Figura 5.5 – Configuração do domínio computacional e condições de contorno. Fonte: Adaptado de Furieri (2012)	124
Figura 5.6 – Representação dos vórtices ao redor de uma pilha de estocagem pelo <i>Q-criterion</i>	126
Figura 5.7 – Localização dos perfis verticais e horizontais de velocidade em escoamento perpendicular à pilha.	127
Figura 5.8 – Perfil nº 1: velocidade média vertical na coordenada $(x, y, z)=(0, -0,154, 0)$. Erro relativo: 3,7%.	128
Figura 5.9 – Perfil nº 2: velocidade média vertical na coordenada $(x, y, z)=(0, 0, 0,08)$. Erro relativo: 7%.	128
Figura 5.10 – Perfil nº 3: velocidade média vertical na coordenada $(x, y, z)=(0, 0,154, 0)$. Erro relativo: 3%.	129
Figura 5.11 – Perfil nº 4: velocidade média vertical na coordenada $(x, y, z)=(0,144, 0,205, 0)$. Erro relativo: 8%.	130
Figura 5.12 – Perfil nº 5: velocidade média horizontal na coordenada $(x, y, z)=(0, 0,154, 0,005)$. Erro relativo: 4,7%.	130
Figura 5.13 – Perfil nº 6: velocidade média horizontal na coordenada $(x, y, z)= (0, 0,308, 0,005)$. Erro relativo: 3,3%.	131
Figura 5.14 – Vista superior do escoamento, colorido por valores de velocidade sobre a superfície de uma pilha isolada perpendicular à direção do escoamento.	131
Figura 5.15 – Vista superior do escoamento, colorido por valores de velocidade de cisalhamento média sobre a superfície de uma pilha isolada perpendicular à direção do escoamento.	132
Figura 5.16 – Vista de frente a um plano colorido por valores de velocidade média. O plano passa no centro do domínio na direção do escoamento.	132
Figura 5.17 – Vista superior do escoamento, colorido por valores de velocidade instantânea na superfície da pilha.	133

Figura 5.18 – Vista superior do escoamento, colorido por valores de velocidade de fricção instantânea na superfície do escoamento.	133
Figura 5.19 – Vista frontal colorida por valores de flutuação de velocidade na direção do escoamento.	134
Figura 5.20 – Vista frontal colorida por valores de velocidade média adimensional na direção do escoamento no plano na coordenada $x=0$	134
Figura 5.21 – Perfil de velocidade média na direção do escoamento, tomado nas coordenadas $(x,y,z)=(0,y,1,25 \times 10^{-3})$, em metros. A pilha (triângulo) tem altura de 0,08 m e largura de 0,205 m. ...	135
Figura 5.22 – Perfil de velocidade média na direção do escoamento, tomado nas coordenadas $(x,y,z)=(0,y,1,25 \times 10^{-3})$, em metros, detalhando o ponto de recolamento na coordenada $(x,y,z)=(0,-1,97,1,25 \times 10^{-3})$	135
Figura 5.23 – Vetor de velocidade obtidos para $u_0 = 6,5$ m/s e escoamento incidente a 90° para uma pilha em experimento com PIV no plano médio do domínio.	136
Figura 5.24 – Vetor de velocidade obtidos para $u_0 = 6,5$ m/s e escoamento incidente a 90° por simulação numérica para uma pilha no plano médio do domínio.	137
Figura 5.25 – Iso-superfícies de velocidade normalizada próximas à parede da pilha.	138
Figura 5.26 – Domínio de avaliação da emissão e dispersão de partículas da pilha.	138
Figura 5.27 – Fator de ressuspensão em função do tempo.	141
Figura 5.28 – Taxa de ressuspensão em função do tempo.	141
Figura 5.29 – Cenários de variação das massas entre os tempos de partículas dentro do domínio entre (a) e (i) são apresentados e discutidos no texto.	142
Figura 5.30 – Relação entre suspensão e deposição instantânea.	143
Figura 5.31 – Esquema de apresentação da concentração espacial instantânea.	144
Figura 5.32 – Esquema de apresentação do perfil de concentração em função da altura, em intervalos de 20 cm a jusante da pilha (2,5 h), para partículas de 100 μm	149
Figura 5.33 – Esquema de apresentação do perfil de concentração em função da altura, em intervalos de 20 cm a jusante da pilha (2,5 h), para partículas de 194 μm	149
Figura 5.34 – Esquema de apresentação do perfil de concentração em função da altura, em intervalos de 0,20 m a jusante da pilha (2,5 h), para todos os tamanhos de partículas.	150
Figura 5.35 – Esquema de apresentação da variação do perfil de concentração instantânea (após 3s de simulação com partículas) no plano transversal ao escoamento, em intervalos de 0,20 m a jusante da pilha (2,5 h), para todos os tamanhos de partículas. A sombra à frente do perfil representa a pilha de estocagem em formato <i>oblong</i>	151
Figura 5.36 – Esquema de apresentação da distribuição de concentração instantânea (após 3s de simulação com partículas) na superfície do domínio ($z=0$): (a) intervalo entre 1.1×10^{-6} a 1×10^{-7} g/cm ³ ; (b) 1.1×10^{-6} a 1×10^{-10} g/cm ³	152
Figura 5.37 – Perfil de cisalhamento médio na superfície do domínio de estudo ($z=0$).	152
Figura 5.38 – Velocidade instantânea adimensional das partículas ao longo do domínio, visão isométrica, $U_0=6,5$ m/s (após 3s de simulação com partículas).	153
Figura 5.39 – Velocidade instantânea adimensional das partículas ao longo do domínio, visão superior, $U_0=6,5$ m/s (após 3s de simulação com partículas).	153
Figura 5.40 – Velocidade instantânea adimensional das partículas ao longo do domínio, visão isométrica com plano no centro da pilha paralelo à direção do escoamento, $U_0=6,5$ m/s (após 3s de simulação com partículas).	154
Figura 5.41 – Esquema de apresentação da velocidade instantânea vertical adimensional das partículas ao longo do domínio, visão superior, $U_0=6,5$ m/s (após 3s de simulação com partículas).	155
Figura 5.42 – Esquema de distribuição do diâmetro da partícula ao longo do domínio, plano $x=0$, $U_0=6,5$ m/s (após 3s de simulação com partículas).	156

Lista de Tabelas

Tabela 3-1 – Multiplicador relacionado ao tamanho da partícula (k) para vários tamanhos aerodinâmicos	70
Tabela 3-2 – Velocidade de fricção limites para diversos materiais e condições. Fonte: USEPA (2006a, 2006b).	71
Tabela 3-3 – Balanço de massa para pilha modelo <i>oblong</i> com diversos percentuais de partículas erodíveis. Fonte: Furieri (2012).	74
Tabela 3-4 – Outras forças que podem ser incorporadas à Eq. 3-137 (ANSYS FLUENT, 2013)	77
Tabela 4-1 – Valores das constantes do modelo de turbulência κ - ω SST. Fonte: Ansys Fluent (2013).	91
Tabela 4-2 – Condições de contorno no domínio computacional para a simulação numérica utilizando o modelo de turbulência κ - ω SST.....	94
Tabela 4-3 – Propriedades do processamento de execução do modelo de turbulência κ - ω SST.	94
Tabela 4-4 – Propriedades do processamento de execução do modelo de turbulência LES, como objetivo de geração inicial dos campos de velocidade.....	96
Tabela 4-5 – Valores selecionados da relação u_s/u_r modificados em relação à metodologia USEPA de quantificação das emissões.....	97
Tabela 4-6 – Valores das constantes para as iso-superfícies.....	99
Tabela 4-7 - Características das partículas de areia para o experimento, considerando espessura da camada limite $\delta=0,20\text{m}$ e velocidade de fricção $u^*=0,29\text{ m/s}$	106
Tabela 4-8 – Lista com softwares utilizados e objetivos dentro do escopo desse trabalho.....	113
Tabela 5-1 – Posições dos perfis de velocidade verticais (1 a 4) e horizontais (5 e 6). Os valores indicam a posição adimensional dos perfis em relação à superfície onde se encontra o centro da pilha ($h=0,08\text{ m}$).	127
Tabela 6-1 – Trabalhos envolvendo simulações existentes na literatura científica e contribuições desse trabalho.....	162

Lista de Símbolos

Letras Romanas

Variável	Definição	[SI]
$\%EP$	Percentual de partículas erodíveis	[-]
a_1, a_2, a_3	Constantes que assumem valores diferentes para cada faixa do Número de Reynolds da partícula	[-]
a_i	Matriz de coeficientes da equação	[-]
\vec{A}_f	Vetor representando a área da face da célula	[m ²]
a_{ij}	Tensor de transformação	[m ² s ⁻²]
A	Taxa da atividade relacionada às estimativas de emissão	variável
A	Parâmetro empírico utilizado no modelo de submalha Smagorinsky	[-]
A_1, A_2, A_3	Parâmetros empíricos relacionados ao fator de correção de Cunningham	[-]
b_i	Matriz de solução	[-]
b_1, b_2, c_1, c_2	Coeficientes relacionados aos valores da massa emitida quantificada	[-]
c	Concentração do contaminante	[kg/kg]
c_0	Coordenada indicativa do centro da célula discretizada	[m]
C_1	Constante associada ao coeficiente normal de restituição	[-]
C_2	Constante associada ao coeficiente tangencial de restituição	[-]
C_c	Fator de correção de Cunningham	[-]
C_d	Coeficiente do modelo Smagorinsky-Lilly dinâmico	[-]
C_k, C_ε	Constante do modelo Modelo LES Algébrico modelado na parede, relacionados à geração e dissipação de energia cinética turbulenta, respectivamente.	[-]
C_D	Coeficiente de arrasto	[-]
C_{ij}	Tensor cruzado	[m ² s ⁻²]
c_p	Calor específico à pressão constante	[Jkg ⁻¹ s ⁻¹]
C_s	Parâmetro empírico constante para o modelo de submalha Smagorinsky	[-]
C_w	Parâmetro empírico constante para o modelo de submalha WALE	[-]
d	Distância do volume de controle mais próximo à parede	[m]
D_m	Difusividade de massa	[m ² s ⁻¹]

Variável	Definição	[SI]
D_p	Diâmetro da partícula	[m]
\tilde{D}_{p-crit}	Diâmetro crítico para que ocorra a suspensão da partícula	[m]
D_{p-ref}	Diâmetro da partícula de referência	[m]
\tilde{D}_p	Diâmetro da partícula normalizado	[-]
$D_{T,p}$	Coefficiente de Termoforese	[Kg ^m s ⁻²]
E	Estimativa de emissão	variável
EF	Fator de Emissão	variável
ER	Eficiência de redução global das emissões	[-]
e_{ij}	Erro associado ao modelo Smagorinsky dinâmico	[m ² s ⁻²]
e_n	Coefficiente normal de restituição	[-]
e_t	Coefficiente tangencial de restituição	[-]
f	Fator de peso; Frequência de Coriolis	[-]; [s ⁻¹]
F	Outras forças incidentes na partícula por unidade de massa	[NKg ⁻¹]
F_l	Força de sustentação	[NKg ⁻¹]
F_d	Força de arraste	[NKg ⁻¹]
F_a	Força de adesão	[NKg ⁻¹]
F_g	Força devido à gravidade	[NKg ⁻¹]
\bar{F}_{aero}	Soma de forças de elevação média	[N]
F'_{aero}	Força de sustentação Flutuante	[N]
\bar{F}_{ad}	Força de resistência à tração média	[N]
F'_{ad}	Força de adesão flutuante	[N]
\hat{f}	Função filtrada dependente da propriedade representada	[-]
f'	Flutuação da função f , unidade dependente da propriedade representada	[-]
f_μ	Função de amortecimento para tratamento na região próxima à parede	[-]
g	Aceleração da gravidade	[ms ⁻²]

Variável	Definição	[SI]
G	Função filtro	$[\text{m}^{-3}]$
\tilde{G}_k	Geração de energia cinética turbulenta devido a gradientes de velocidade média	$[\text{m}^2\text{s}^{-2}]$
g_i	Componente da aceleração da gravidade na direção i	$[\text{ms}^{-2}]$
h	Entalpia	$[\text{m}^2\text{s}^{-2}]$
H	Termo de fonte de energia	$[\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-3}]$
h_s	Altura média dos elementos rugosos	$[\text{m}]$
h_s^+	Altura média adimensional dos elementos rugosos	$[-]$
k	Coefficiente multiplicador dependente do tamanho das partículas	$[-]$
k_B	Constante de Boltzmann	$[\text{JK}^{-1}]$
k_c	Condutividade térmica do ar	$[\text{kgmK}^{-1}\text{s}^{-3}]$
k_{sgs}	Energia cinética turbulenta na submalha	$[\text{m}^2\text{s}^{-2}]$
K_n	Número de <i>Knudsen</i>	$[-]$
L	Escala horizontal de comprimento	$[\text{m}]$
l	Tamanho da escala de comprimento não resolvida (escala de submalha)	$[\text{m}]$
l_{mix}	Comprimento de mistura na função de amortecimento do modelo Smagorinsky	$[\text{m}]$
L_{ij}	Tensor de Leonard	$[\text{m}^2\text{s}^{-2}]$
L_s	Comprimento de mistura da escala de submalha	$[\text{m}]$
M	Número de subáreas da superfície da pilha sujeitas a u_s uniforme; Termo de fonte de massa	$[-]$ $[\text{kgs}^{-1}\text{m}^{-3}]$
M_{bal}	Balanço de massa	$[\text{g}]$
M_{ij}^r, M_{ij}^t	Tensor associado a constante do modelo Smagorinsky dinâmico no filtro da malha e filtro de teste, respectivamente.	$[\text{Nm}^{-2}]$
m_p	Massa da partícula	$[\text{kg}]$
N	Número total de perturbações por ano	$[-]$
N_i	Função de forma de um VC no nó i	$[-]$

Variável	Definição	[SI]
p_m	Pressão mecânica	$[\text{Nm}^{-2}]$
p	Pressão termodinâmica	$[\text{Nm}^{-2}]$
P	Potencial de erosão	$[\text{kgm}^{-2}]$
P_i	Potencial de erosão correspondente a maior velocidade do vento para o i -ésimo período entre as perturbações	$[\text{gm}^{-2}]$
P_{ij}	Potencial de erosão da maior velocidade do vento para o i -ésimo período entre perturbações para cada um das j -ésima áreas da pilha	$[\text{gm}^{-2}]$
P_{mod}	Potencial de erosão modificado	$[\text{gm}^{-2}]$
P_{tc}	Trajetória cruzada da partícula	$[-]$
\hat{p}	Pressão termodinâmica filtrada	$[\text{Nm}^{-2}]$
q_{sgs}	Escala de velocidade não resolvida	$[\text{ms}^{-1}]$
Re_p	Número de Reynolds da partícula	$[-]$
R_{ij}	Tensor análogo ao tensor das tensões de Reynolds	$[\text{m}^2\text{s}^{-2}]$
Ro	Número de Rossby	$[-]$
r_p	Coordenada da partícula	$[\text{m}]$
r_{ij}	Tensor de velocidade anisotrópica	$[\text{m}^2\text{s}^{-2}]$
s	Comprimento do VC na direção y	$[\text{m}]$
Sc	Número de Schmidt	$[-]$
S_{ij}	Subárea superficial da pilha sujeitas a u_s uniforme; Tensor de deformação	$[\text{m}^2]$ $[\text{s}^{-1}]$
\widehat{S}_{ij}	Tensor de deformação calculado em função das escalas resolvidas diretamente	$[\text{s}^{-1}]$
S_t	Número de Stokes da partícula	$[-]$
S_{t_l}	Número de Stokes da partícula na escala de Kolmogorov	$[-]$
S_{t_L}	Número de Stokes da partícula nas maiores escalas	$[-]$
t	Tempo	$[\text{s}]$
T	Temperatura	$[\text{K}]$
T_{ij}	Tensor de escala de submalha na escala Δ'	$[\text{s}^{-1}]$

Variável	Definição	[SI]
U_{∞}	Velocidade do fluido na corrente livre	$[\text{ms}^{-1}]$
U	Escala integral de velocidade	$[\text{ms}^{-1}]$
u_{in}^p	Velocidade de incidência da partícula na superfície	$[\text{ms}^{-1}]$
u_n^p	Componente normal da velocidade de incidência da partícula na superfície	$[\text{ms}^{-1}]$
u_t^p	Componente tangencial da velocidade de incidência da partícula na superfície	$[\text{ms}^{-1}]$
U_i, U_j, U_k	Velocidade nas direções i, j e k , respectivamente	$[\text{ms}^{-1}]$
$\widehat{U}_i, \widehat{U}_j$	Componente da velocidade filtrada nas direções i e j , respectivamente	$[\text{ms}^{-1}]$
u'_i, u'_j	Flutuações de velocidades instantâneas nas direções i e j , respectivamente	$[\text{ms}^{-1}]$
u_p	Velocidade da partícula	$[\text{ms}^{-1}]$
u_p^0	Velocidade da partícula no instante $t=0$	$[\text{ms}^{-1}]$
u_r	Velocidade de referência	$[\text{ms}^{-1}]$
u_s	Velocidade do vento na superfície da pilha na altura padrão (25 cm)	$[\text{ms}^{-1}]$
u^*	Velocidade de fricção	$[\text{ms}^{-1}]$
\tilde{u}_{\min}^*	Menor valor da velocidade de fricção normalizada	[-]
u_{ref}^*	Velocidade de fricção de referência	[-]
$\widetilde{u}_{t-\min}^*$	Menor valor da velocidade de fricção limite normalizada	[-]
\widetilde{u}^*	Velocidade de fricção normalizada	[-]
u_t^*	Velocidade de fricção limite	$[\text{ms}^{-1}]$
u^+	Velocidade adimensional na parede	[m]
u_{10}^+	Maior velocidade medida na altura de referência entre dois distúrbios da pilha de estocagem de partículas	$[\text{ms}^{-1}]$
\widetilde{u}_t^*	Velocidade de fricção limite de referência	$[\text{ms}^{-1}]$
u'_i	Componente das escalas residuais de velocidade	$[\text{ms}^{-1}]$
\bar{u}	Velocidade média do escoamento	$[\text{ms}^{-1}]$
V	Volume	$[\text{m}^3]$
V_d	Velocidade de deposição	$[\text{ms}^{-1}]$
v_{reb}^p	Velocidade de ressuspensão da partícula	$[\text{ms}^{-1}]$

Variável	Definição	[SI]
v_n^p	Velocidade normal de ressuspensão da partícula	$[ms^{-1}]$
v_t^p	Velocidade tangencial de ressuspensão da partícula	$[ms^{-1}]$
ν	Viscosidade cinemática do fluido	$[m^2s^{-1}]$
v_g	Velocidade de deposição gravitacional da partícula	$[ms^{-1}]$
v_f'	Flutuação vertical da velocidade	$[ms^{-1}]$
x'	Coordenada onde as operações envolvendo os integrandos no espaço são calculadas para cada tempo t	$[m]$
x_p	Posição da partícula	$[m]$
x_p^0	Posição da partícula no instante t=0	$[m]$
x_p^n	Posição da partícula no instante t=n	$[m]$
y^+	Distância normalizada à parede	$[-]$
YL	Comprimento do domínio computacional na direção y	$[m]$
ZL	Comprimento do domínio computacional na direção z	$[m]$

Letras gregas

Variável	Definição	[SI]
α	Fator de relaxação aplicado ao coeficiente Smagorinsky dinâmico	[-]
α_v	Relação entre as frações de volume das partículas e volume do fluido	[-]
γ_p	Gravidade aparente	[ms ⁻²]
$\Gamma_\kappa, \Gamma_\omega$	Difusividade devido à geração de energia cinética turbulenta	[m ² s ⁻¹]
Γ_ω	Difusividade devido à dissipação de energia cinética turbulenta	[m ² s ⁻¹]
δ	Altura da camada limite	[m]
δt	Passo de tempo	[s]
Δ	Comprimento de corte do filtro	[m]
Δ^t	Largura do filtro de teste no modelo Smagorinsky dinâmico	[m]
Δ^r	Largura do filtro da malha no modelo Smagorinsky dinâmico	[m]
Δ_f	Largura do filtro da malha no modelo LES modelado na parede	[m]
Δu^+	Deslocamento entre perfil logarítmico em parede lisa e perfil real devido à parede rugosa	[m]
Δx	Banda do filtro na direção x	[m]
Δy	Banda do filtro na direção y	[m]
Δz	Banda do filtro na direção z	[m]
Δ_i	Componente da banda do filtro na direção i	[m]
δ_{ij}, δ_{3i}	Delta de Kronecker	[-]
ε_{ijk}	Símbolo de Levi-Civita ou tensor alternado	[-]
η	Escala de Kolmogorov de comprimento	[m]
θ	Ângulo de incidência da partícula na superfície	rad
φ	Variável genérica a ser discretizada no método numérico Gauss-Green	Depende da variável
$\bar{\varphi}_f$	Valor da variável φ discretizada no centroide da face da célula	[-]
ϕ	Latitude	[-]
$\hat{\phi}$	Função filtrada	Depende da função

Variável	Definição	[SI]
\emptyset	Função original representada no modelo de turbulência LES	Depende da função
\emptyset_m	Relação entre a massa da partícula e massa do fluido	[-]
κ	Constante de von Kármán	[-]
κ	Energia cinética turbulenta	[m ² s ⁻²]
λ	Comprimento do livre caminho médio nos gases; Viscosidade de bulk ou segundo coeficiente de viscosidade	[m]; [kgm ⁻¹ s ⁻¹]
μ	Viscosidade dinâmica do fluido	[kgms ⁻¹]
μ_{sgs}	Viscosidade turbulenta da escala de submalha	[kgms ⁻¹]
μ_t	Viscosidade turbulenta	[kgms ⁻¹]
ν	Viscosidade cinemática do fluido	[m ² s ⁻¹]
Π	Produtório	[m ⁻³]
ρ, ρ_{ar}	Densidade do fluido	[kgm ⁻³]
ρ_p	Densidade da partícula	[kgm ⁻³]
τ_{ij}	Tensor total das tensões	[Nm ⁻²]
τ_{ij}^r	Tensor de submalha na escala Δ^r do modelo Smagorinsky dinâmico	[Nm ⁻²]
τ_{ij}^S, τ_{kk}^S	Tensor das tensões de Reynolds da escala de submalha	[m ² s ⁻²]
τ_l	Escala de tempo das menores escalas (Kolmogorov)	[s]
τ_L	Escala de tempo das grandes estruturas turbulentas	[s]
τ_p	Tempo de relaxação da partícula	[s]
τ_ω	Tensão de cisalhamento na parede	[Nm ⁻²]
Φ	Dissipação viscosa da energia	[kgm ⁻¹ s ⁻³]
ω	Concentração do contaminante	[kgkg ⁻¹]
ω_p	Velocidade angular de ressuspensão	[s ⁻¹]
$\hat{\omega}$	Concentração da espécie química filtrada	[kgkg ⁻¹]
Ω	Frequência angular da rotação planetária	[s ⁻¹]

Ω_j	Vetor velocidade angular na direção j	$[\text{s}^{-1}]$
Ω_p	Velocidade angular de incidência	$[\text{s}^{-1}]$

Símbolos especiais e operadores

$\hat{\cdot}$	Propriedade filtrada
$\bar{\cdot}$	Desvio do valor médio
∂	Derivada parcial
∇	Operador divergente
\circ	Nível de tempo anterior
d	Derivada total
r	Representação das variáveis no filtro de malha no modelo Smagorinsky dinâmico
t	Representação das variáveis no filtro de teste no modelo Smagorinsky dinâmico

Sumário

1	INTRODUÇÃO.....	24
2	OBJETIVOS.....	29
2.1	Objetivo geral.....	29
2.2	Objetivos específicos	29
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	30
3.1	Conceitos fundamentais	30
3.1.1	Introdução à erosão eólica.....	31
3.1.1.1	<i>As forças que agem na partícula e os modos de transporte.....</i>	<i>32</i>
3.1.1.2	<i>Erodibilidade de partículas.....</i>	<i>36</i>
3.1.1.3	<i>Modelos de colisão de partículas.....</i>	<i>39</i>
3.1.2	Escoamento de fluidos – abordagem euleriana.....	41
3.1.2.1	<i>Modelos baseados em RANS.....</i>	<i>46</i>
3.1.2.2	<i>Escoamento turbulento próximo à superfície.....</i>	<i>51</i>
3.1.2.3	<i>Escoamento e dispersão ao redor de obstáculos</i>	<i>54</i>
3.1.2.4	<i>Modelos baseados em LES.....</i>	<i>58</i>
3.1.3	Modelagem da emissão de partículas.....	69
3.1.4	Dispersão atmosférica de partículas - abordagem lagrangiana.....	75
3.1.5	Distribuição de tamanho das partículas.....	77
3.2	Trabalhos correlatos	79
3.2.1	Escoamento ao redor de obstáculos	79
3.2.2	Modelos Euler-lagrange.....	83
3.2.3	Condição de entrada para LES.....	85
3.2.4	Condições de parede	86
3.2.5	Estudos em túnel de vento.....	87
3.3	Conclusões da revisão bibliográfica.....	88
4	METODOLOGIA.....	90
4.1	Modelagem Euleriana do escoamento atmosférico.....	91
4.1.1	Condição inicial – Solução das equações com o modelo de turbulência $\kappa\omega$ -SST	91
4.1.2	Solução das equações governantes utilizando o modelo de turbulência LES	94
4.2	Modelagem lagrangiana da dispersão atmosférica da partícula.....	96
4.2.1	Estimativa da taxa de emissão das partículas na superfície da pilha	96
4.2.2	Determinação da trajetória da partícula	102
4.2.3	Algoritmo de modelagem da fase partícula.....	104

4.3	Validação da modelagem do escoamento e dispersão de partículas por meio de experimentos com leito de partícula em túnel de vento de Zhang, Wang e Lee (2007) e Cierco <i>et al.</i> (2008)	106
4.4	Validação da modelagem do escoamento em pilhas de estocagem por meio de experimentos em túnel de vento realizados por Turpin (2010)	110
4.5	Sistema computacional de desenvolvimento	113
4.6	Desenvolvimento de programas de pós-processamento para tratamento da movimentação de partículas	114
4.7	Resumo da Metodologia	115
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	117
5.1	Simulação numérica de experimento realizado por Zhang, Wang e Lee (2007)	117
5.2	Escoamento ao redor da pilha de estocagem.....	123
5.3	Dispersão de partículas emitidas da pilha de estocagem por erosão eólica	137
6	CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	157
7	REFERÊNCIAS.....	165
	ANEXO I – Demonstração da variação da temperatura na atmosfera neutra ...	174
	ANEXO II – Detalhe das sub-rotinas de injeção de partículas na superfície da pilha.....	179
	ANEXO III – Pós-processamento do arquivo de partículas para cálculo do perfil de velocidade e concentração.....	181

1 INTRODUÇÃO

A presença de material particulado (MP) na atmosfera pode causar desde redução da visibilidade (Wu *et al.*, 2005; Huang *et al.*, 2009), formação de nuvens e precipitação (Seinfeld e Pandis, 2006; Altaratz *et al.*, 2014), alteração do balanço radiativo da atmosfera (Finlayson-Pitts & Pitts Jr, 2000; Rosario *et al.*, 2011), danos à vegetação (Farmer, 1993; Onder & Dursun, 2006), desgaste de edifícios e de monumentos (Hyslop, 2009), incômodos (Stenlund *et al.*, 2009; Jacquemin, 2007; Amundsen *et al.*, 2008; Nikolopoulou *et al.*, 2011) e danos diretos à saúde humana (Holgate *et al.*, 1999; WHO, 2005; Roberts, 2004; Pope & Dockery, 2006; Tainio *et al.*, 2010). Assim, o MP pode afetar o bem-estar e a saúde da população, além de criar condições adversas às atividades sociais.

A poluição do ar por MP pode ter origem antropogênica, por exemplo, processos siderúrgicos, construção civil, exploração, beneficiamento, movimentação e estocagem de materiais fragmentados e ressuspensões de solos, entre outras. Também pode ter origem natural devido à presença do mar (aerossóis marinhos) e queimas ao ar livre.

Os efeitos causados pelo MP dependem de suas características químicas e granulométricas. O tamanho das partículas está relacionado às fontes de origem: as partículas com diâmetro inferior a 2,5 μm têm como origem, principalmente, os processos de combustão; pólenes e húmus são partículas com diâmetro inferior a 10 μm e areia fina de praias constitui exemplo de partículas com diâmetro inferior a 100 μm .

As fontes geradoras de MP também podem ser classificadas como: *i*) primárias, uma vez que são emitidas diretamente de suas fontes, como em processos industriais, queima de combustíveis e veículos em locomoção ou secundárias, resultantes de transformações físicas e químicas na atmosfera, por parte de poluentes primários, *ii*) pontuais (chaminés e queimadores de gases, *iii*) de volume (correias transportadoras e pilhas de carvão ou minério), de linha (estradas ou exaustores de teto de fábricas) ou área (pedreiras); *iv*) ainda podem ser fixas (chaminés) ou móveis (automóveis), e por fim, *v*) contínuas ou instantâneas.

As fontes podem ser também classificadas como difusas que são fontes primárias, fixas, não pontuais (sem captura ou confinamento) e, geralmente, instantâneas. A geração de partículas sólidas a partir de fontes difusas pode ser ocasionada por dois fenômenos distintos: *i*) pulverização ou abrasão de superfícies por forças mecânicas, *ii*) erosão eólica, quando há suspensão de partículas devido às tensões cisalhantes originadas pelo escoamento atmosférico

turbulento sobre superfícies sólidas onde as partículas estavam depositadas. Essas fontes também são conhecidas como fontes fugitivas.

Fontes difusas podem estar presentes em atividades agrícolas, construção civil, mineração, estradas, ruas pavimentadas e não pavimentadas ou estocagem de material granular em pátios abertos. Por exemplo, atividades agrícolas podem resultar em emissão sazonal de partículas para a atmosfera durante processos de preparação do solo para semeadura e colheita mecânica. A construção de edificações e estradas ou ruas pode causar emissões temporárias associadas à limpeza de terrenos, escavações, perfurações e cobertura das superfícies. Veículos circulando sobre vias não pavimentadas podem causar emissão devido ao atrito entre as rodas e as vias, e podem, ainda, causar a suspensão das partículas que são capturadas na região de esteira do escoamento à jusante do veículo. Pátios de estocagem são representados por grandes áreas abertas em sítios industriais usados para acumulação de material granular exposto à ação dos ventos que ocasionam a emissão de partículas suspensas da superfície devido ao arrasto eólico.

A erosão eólica é um processo natural que promove a movimentação de partículas em uma dada superfície originando o entranhamento de partículas para a atmosfera ou o rolamento das partículas sobre a superfície. Conforme Duran *et al.* (2011), se o escoamento atmosférico sobre uma superfície contendo aglomerados de partículas excede determinada velocidade de fricção limite, as partículas presentes na superfície iniciam movimento e são transportadas para outras regiões.

No entanto, a erodibilidade da superfície perturbada também depende da proporção de partículas erodíveis em relação às partículas não erodíveis presentes na superfície. Segundo Gillette & Stockton (1989), as partículas não erodíveis promovem a diminuição da quantidade de movimento do escoamento de ar na superfície e, assim, podem evitar a movimentação das partículas potencialmente erodíveis. Medições experimentais, em que são analisados os elementos não erodíveis, demonstram que há um aumento da velocidade de fricção limite com o aumento da proporção de partículas não erodíveis (FURIERI, 2012; TURPIN, 2010).

Além da presença das partículas não erodíveis, outros fatores podem influenciar a erosão eólica: as condições atmosféricas (tais como, velocidade do vento, precipitação - chuva, umidade e temperatura) e as características da superfície erodida (tais como topografia, rugosidade da superfície, umidade da superfície e cobertura vegetal).

A física da erosão envolve dois tipos de forças: aerodinâmicas, que tendem a remover as partículas da superfície em que se encontram, e as forças gravitacionais e de adesão entre partículas que tendem a resistir à remoção (SHAO, 2008). Dependendo do balanço dessas forças, pode ocorrer suspensão, deposição ou saltos das partículas. Os saltos podem levar a choques com outras partículas, fazendo com que haja emissão dessas últimas.

As pilhas de estocagem são fontes difusas de partículas e também obstáculos ao escoamento atmosférico, têm geometria complexa e promovem linhas de corrente divergentes, geram gradientes de pressão adversos e alteram a quantidade de movimento perpendicular à superfície sólida e, conseqüentemente, influenciam a quantidade de partículas emitidas a partir da sua superfície (BADR e HARION, 2005).

O modelo USEPA (2006a, 2006b) foi desenvolvido para estimativa da quantidade de massa de partículas emitidas em uma pilha de estocagem por erosão eólica. Esse modelo é constituído por equações empíricas e foi formulado por meio de medições utilizando túnel de vento portátil (CPM RT 204/10; MRI[®] REPORT, 1995). A formulação do modelo considera a distribuição da velocidade de fricção na superfície da pilha.

A velocidade de fricção pode ser determinada por meio da solução numérica das equações fundamentais de transporte para o escoamento turbulento ao redor das pilhas, que por sua vez pode ser modelado utilizando o modelo de simulação das grandes escalas (LES - *Large Eddy Simulation*). Esse modelo tem obtido bons resultados em relação a outros modelos, quando comparados aos dados experimentais considerando a presença de obstáculos (MURAKAMI, 1993; SADA & SATO, 2002; SALIM *et al.*, 2011; BERROUK & LAURENCE, 2008; MURAKAMI & IIZUKA, 1999; TOMINAGA & STATHOPOULOS, 2010; GOUSSEAU *et al.*, 2011, 2013). No entanto, simulações envolvendo modelos de turbulência LES são complexas e requerem alto poder (capacidade) de processamento computacional. Desse modo, alguns autores utilizaram modelo de turbulência baseado nas técnicas RANS (*Reynolds-averaged Navier-Stokes*) (DIEGO *et al.*, 2009, TURPIN, 2010; FURIERI, 2013, TORAÑO *et al.*, 2007).

Frente aos problemas ambientais inerentes ao MP emitido de pilhas de estocagem e aos fenômenos existentes na superfície e no entorno da pilha, é importante uma análise da suspensão de MP, além da deposição e ressuspensão no seu entorno. No entanto, existem complexas interações entre os vórtices turbulentos com a superfície de deposição. Os vórtices de baixa frequência promovem as oscilações na direção do vento incidente na pilha de estocagem, que ora se comportam como uma fonte de volume, ora como um obstáculo ao

escoamento e que promove o surgimento de regiões de recirculação e movimentos turbulentos tridimensionais e anisotrópicos a jusante da pilha.

A presença de fronteira sólida afeta a física das escalas turbulentas de diversos modos. Primeiro, o crescimento das pequenas escalas é inibido pela presença da parede. Segundo, é alterado o mecanismo de troca entre as escalas resolvidas e não resolvidas: na região próxima da parede as menores escalas podem conter significativos eventos produtores de tensões de Reynolds. Além disso, o comprimento de escala das grandes estruturas que transportam energia é dependente do número de Reynolds nessa região. Se a camada próxima à parede é resolvida, os eventos importantes de produção de energia devem ser captados, uma vez que as suas dimensões escalam com o número de Reynolds, tal como o custo do cálculo na utilização do modelo de turbulência LES. Os modelos Smagorinsky Dinâmico (Germano *et al.*, 1991) e WALE (*Wall Adaptive Local Eddy-Viscosity*), proposto por Nicou & Ducros (1999) representam melhor o comportamento do escoamento próximo a paredes sólidas (RIETH *et al.*, 2014; WEICKERT *et al.*, 2010; BEN-CHEIKH *et al.*, 2012).

No entanto, a literatura investigada não apresenta simulações numéricas em pilhas de estocagem que envolva a associação do modelo de emissão USEPA com uma modelagem de turbulência da simulação das grandes escalas (LES) para o escoamento, segundo abordagem Euleriana e movimento das partículas emitidas da pilha utilizando a abordagem lagrangiana.

A dispersão, deposição e ressuspensão de partículas expostas ao escoamento turbulento da atmosfera também podem ser investigadas por meio da solução numérica das equações fundamentais de transporte. Alguns trabalhos encontrados na literatura utilizaram os modelos RANS para incluir os efeitos da turbulência atmosférica na modelagem da movimentação das partículas (DIEGO *et al.*, 2009; PARKER & KINNERSLEY, 2004, FARIMANI *et al.*, 2011).

Entretanto, pode se utilizar uma abordagem lagrangiana para descrever o transporte das partículas associado à abordagem euleriana para descrever o escoamento atmosférico. A predição da trajetória da partícula é efetuada pela integração do balanço de forças que agem na partícula (adesão, arraste, gravidade, entre outras). O acoplamento Euler-Lagrange é feito por meio da influência da distribuição de velocidades da fase fluido na distribuição de velocidade da fase partícula.

Vale ressaltar que as simulações estão relacionadas a diversos fatores, entre eles: (i) alto poder computacional necessário para o tratamento do arraste e transporte das partículas; (ii) geração das condições turbulentas na entrada do domínio; (iii) validação da simulação numérica do

modelo LES com experimentos (abordagem euleriana); (iv) modelagem da emissão por meio do modelo de emissão USEPA; (v) Validação da dispersão das partículas emitidas da pilha de estocagem; (vi) Investigação do movimento das partículas por meio da abordagem lagrangiana.

No entanto, justifica-se a simulação numérica da dispersão, deposição, suspensão e deposição das partículas de pilhas de estocagem, uma vez que houve um considerável aumento do poder de processamento disponível aos pesquisadores a um custo-benefício satisfatório. Também houve avanço nas metodologias de geração de condições de contorno de entrada para modelos de turbulência LES. A emissão das partículas pode ser simulada por meio do modelo de emissão USEPA e a dispersão das partículas emitidas para a atmosfera pode ser modelada utilizando as técnicas lagrangianas de transporte das partículas.

Trabalhos envolvendo experimentos em túnel de vento podem ser boas alternativas para validação do escoamento ao redor de pilhas e dispersão das partículas (CIERCO *et al*, 2008; ZHANG, WANG e LEE, 2007; ZHANG, KANG e LEE, 2007; FURIERI, 2012).

Nesse contexto, o objetivo desse trabalho é investigar a suspensão, deposição e ressuspensão de material particulado de diferentes tamanhos emitidos de uma pilha de estocagem em condições de estabilidade neutra, utilizando a modelagem Euler-Lagrange para a dispersão atmosférica de partículas emitidas por erosão eólica, sendo a descrição euleriana para o escoamento do ar, incluindo os efeitos da turbulência por meio do modelo LES com geração sintética de turbulência na entrada do domínio, e descrição lagrangiana para a movimentação das partículas acoplada ao modelo de emissão da USEPA (2006).

Este trabalho está dividido em 4 capítulos, além da Introdução. O Capítulo 2 lista os objetivos gerais e específicos propostos; o Capítulo 3 divide-se em duas grandes seções: a primeira descreve os conceitos fundamentais e teoria que dão suporte ao trabalho; a segunda lista os trabalhos correlatos; no Capítulo 4 está o desenvolvimento da metodologia utilizada, enquanto o Capítulo 5 apresenta os resultados e discussões. Finalmente o Capítulo 6 mostra as conclusões, recomendações e trabalhos futuros.

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo geral

Investigar a suspensão, deposição e ressuspensão de material particulado de diferentes tamanhos emitidos de uma pilha de estocagem de granulados, por erosão eólica, em condições de estabilidade neutra.

2.2 Objetivos específicos

- Propor o acoplamento do modelo de emissão USEPA de partículas em pilhas de estocagem com o modelo de dispersão;
- Propor e validar a modelagem Euler-Lagrange para a dispersão atmosférica de partículas emitidas por erosão eólica, utilizando a descrição euleriana para o escoamento de ar, incluindo os efeitos da turbulência por meio do modelo LES com geração sintética de turbulência na entrada do domínio e a descrição lagrangiana para movimentação das partículas.
- Analisar o fenômeno de suspensão, deposição e ressuspensão das partículas;
- Avaliar a influência da presença da pilha de estocagem na dispersão atmosférica das partículas;

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Esta revisão de literatura está distribuída em duas principais seções que se subdividem em dois grandes tópicos: O primeiro tópico, representado pela Seção 3.1, trata dos conceitos fundamentais sobre erosão eólica, modelagem numérica da turbulência – descrição euleriana e modelagem numérica – descrição lagrangiana do movimento das partículas, influência do obstáculo no escoamento e dispersão e investigações experimentais da emissão de MP. Finalmente, para contextualizar o presente estudo, a segunda grande seção apresenta alguns trabalhos realizados na área de Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) para o estudo da dispersão de poluentes e escoamento na atmosfera ao redor de um obstáculo isolado.

A divisão dos conceitos fundamentais apresenta a Seção 3.1.1, com a descrição do fenômeno da erosão eólica e suspensão de aglomerados de partículas, as forças que agem nas partículas e modelos de colisão. A Seção 3.1.2 é dedicada a formulações matemáticas e de turbulência empregadas para modelar o escoamento de fluidos. A Seção 3.1.3 explica os conceitos e formulações relativos à modelagem de emissão USEPA. As seções 3.1.4 e 3.1.5 fecham a primeira parte da revisão da literatura apresentando as equações lagrangianas para o movimento das partículas e a metodologia estatística para a distribuição de tamanho das partículas, respectivamente.

O segundo tópico, listado nas subseções da Seção 3.2, relaciona os trabalhos da literatura que tratam dos conceitos fundamentais apresentados na Seção 3.1 e que formam a base teórica para o desenvolvimento desse trabalho. A Seção 3.2.1 relaciona trabalhos com escoamento ao redor de obstáculos cúbicos e pilhas, que utilizam modelos de turbulência importantes para esse trabalho, como κ - ω e LES. A Seção 3.2.2 apresenta estudos focando a abordagem Euler-lagrangiana, enquanto a Seção 3.2.3 demonstra o quanto é importante as condições de entrada para os modelos de turbulência das grandes escalas, mostrados por simulações numéricas. Finalizando o capítulo, a Seção 3.2.4 servirá de apoio às validações das simulações numéricas que esse trabalho propõe, com os estudos de interesse em túneis de vento.

3.1 Conceitos fundamentais

Essa seção cobre os fenômenos envolvidos com a erosão eólica devido à velocidade do vento, as forças que agem na partícula e os modos de transporte que existem devido à erosão; demonstra as formulações que relacionam parâmetros de turbulência aos modos de transporte; descreve a influência dos obstáculos frente ao escoamento e dispersão e mostra o modelo

USEPA de emissão de partículas. Finalmente são discutidos alguns modelos de colisão de partículas com a superfície e o modelo estatístico de distribuição de tamanho de partículas.

3.1.1 Introdução à erosão eólica

A erosão eólica é um processo natural que perturba uma dada superfície originando o movimento de partículas para a atmosfera. Em síntese, se a velocidade do vento (ou seu gradiente vertical) sobre uma superfície que contém um aglomerado de partículas, tais como areia, minerais ou carvão, excede um limiar as partículas entram em movimento e são transportadas para outros locais (DURAN *et al.*, 2011). A erosão causada pelo vento depende de diversos fatores, como composição química do material granular, densidade, condições atmosféricas (tais como velocidade do vento, turbulência atmosférica, precipitação, umidade e temperatura) e características da superfície erodida (por exemplo: topografia, rugosidade, umidade da superfície, cobertura vegetal e presença de partículas não erodíveis).

Análises de fontes difusas desenvolvidas pela USEPA (2006b) demonstram que a geração de partículas de tamanhos menores que 75 μm podem ser causadas por dois fenômenos principais: (i) pulverização ou abrasão do material da superfície por forças mecânicas e (ii) entranhamento das partículas, removidas da superfície pelo cisalhamento do vento e pela turbulência, gerando condições para eventos de erosão eólica.

O modelo USEPA (2006) relaciona as categorias das fontes difusas em: (i) operações de agricultura; (ii) construção; (iii) rodovias pavimentadas ou não e (iv) pilhas de pátio de estocagem de material granulado. As emissões de material particulado de operações de agricultura resultam de distúrbios que ocorrem durante a preparação do solo para a plantação e são considerados distúrbios mecânicos com padrão sazonal.

Operações de construção podem causar um temporário e agudo impacto na qualidade do ar e emissões de construções e rodovias estão associados com limpeza, detonação, perfuração e enchimento. Veículos trafegando em rodovias não pavimentadas causam a pulverização do material da superfície devido ao impacto das rodas na superfície da rodovia. As partículas são suspensas e espalhadas na superfície da rodovia e uma esteira turbulenta atrás do veículo continua movimentando as partículas. Pilhas de estocagem são grandes áreas encontradas em indústrias para o armazenamento de materiais granulados. Uma significativa contribuição para a poluição atmosférica é a emissão devido a eventos de erosão que agem nessa categoria de fontes difusas.

A erosão eólica de areia proveniente de dunas e seu transporte tem chamado a atenção da comunidade científica desde a década de 1970 (WILSON, 1973). As investigações iniciaram com Bagnold (1941), e tinham como foco o movimento individual de partículas no escoamento. Depois disso, alguns trabalhos discutiram as implicações da estrutura do escoamento em torno da fonte; entre eles, Lancaster *et al.* (1996), McKenna *et al.* (1997) e Parsons *et al.* (2004) melhoraram a descrição das interações entre o escoamento do fluido em torno de obstáculos e a erosão eólica envolvida.

Mais recentemente, diversos experimentos e simulações numéricas de escoamento ao redor de obstáculos têm sido feitos envolvendo a erosão eólica sobre aglomeração de materiais granulares sem barreira (Ferreira & Oliveira, 2009; Ferreira & Lambert, 2011; Cong *et al.*, 2011 e Furieri, 2012, 2013) ou com barreiras (Faria *et al.*, 2011). Badr & Harion (2005) descreveram a presença de pilhas agindo como obstáculos ao escoamento como responsáveis pelos gradientes de pressão no escoamento próximos à superfície das pilhas. A complexa superfície desses obstáculos altera a dinâmica do escoamento, e a magnitude e as extensões das modificações são essencialmente controladas pelas configurações das pilhas e condições do vento (BADR & HARION, 2007; TURPIN & HARION, 2009, 2010).

3.1.1.1 As forças que agem na partícula e os modos de transporte

O entendimento dos mecanismos de erosão das partículas da pilha é importante para avaliação mais acurada do transporte destas partículas e para calcular os níveis de concentração das suspensões, ressuspensões e deposições de modo a traçar estratégias de diminuição dos impactos ambientais. Esses processos envolvem interações entre partículas e escoamento, partículas e superfície e entre partículas. Também as propriedades individuais de cada partícula, tais como densidade e tamanho, afetam essas interações (SHAO, 2008). Além disso, outros fatores afetam o fenômeno físico de erosão de partículas: (i) razão de densidade entre fluido e partícula; (ii) massa da partícula, a qual por sua vez está associada à densidade e tamanho; (iii) viscosidade do fluido. Esses parâmetros definem as forças que agem sobre uma partícula erodida pelo escoamento do fluido.

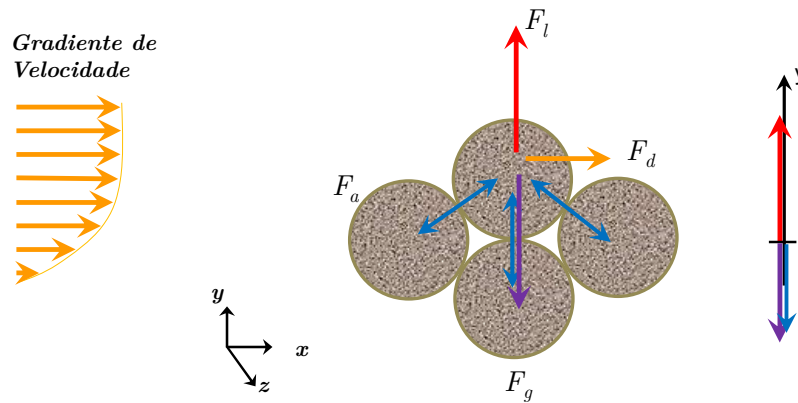


Figura 3.1 – Forças que agem na partícula submetida a um gradiente de velocidade: Sustentação(F_l); Arraste(F_d); Adesão(F_a) e Gravidade (F_g). Adaptado de Descamps (2004).

A Figura 3.1 representa as principais forças envolvidas: sustentação (F_l); arraste (F_d); adesão (F_a) e gravidade (F_g). As forças de sustentação e arraste são forças associadas com a razão de densidade entre fluido/partícula e viscosidade do ar. A força de gravidade está associada à massa da partícula. Por fim, a força de adesão é dependente do diâmetro da partícula e efetiva área de contato entre partículas adjacentes (ZHAO *et al.*, 2003; BOWLING, 1988). Com exceção da força da gravidade, as forças restantes somente são calculadas de modo empírico ou semi-empírico.

Uma vez conhecidas as forças que agem na partícula, são apresentados os três modos de transporte por erosão: suspensão (pura ou modificada), saltos (puros ou modificados) e rolamento¹.

Movimentos de suspensão estão associados a pequenas partículas. A Figura 3.2-a representa a suspensão pura, quando as forças aerodinâmicas se sobressaem e são dominantes (sustentação e arraste). Nesse caso, os movimentos são associados a partículas que não tem peso suficiente e são pequenas o bastante para ficar à mercê do escoamento livre. Essas partículas são suspensas da superfície pelas forças de sustentação e pelos movimentos turbulentos do escoamento do vento. No caso da suspensão ser modificada (Figura 3.2-a), a força peso das partículas tem maior importância que a suspensão pura. Assim as partículas não são afetadas pelas pequenas escalas dos vórtices turbulentos devido à inércia. Partículas erodidas pelo modo de suspensão pura são transportadas a distâncias maiores que as partículas sujeitas à suspensão modificada.

Outro modo de transporte, chamado salto, está associado ao choque entre as partículas em suspensão e no leito, fazendo com que essas últimas sejam suspensas do leito de partículas.

¹ Tradução livre dos termos *Suspension*, *Saltation* e *Reptation*, respectivamente.

Segundo Shao (2008), Zhang, Wang e Lee (2007) e Zhang, Kang e Lee (2007), esse é o principal mecanismo de transporte de grandes quantidades de partículas na direção do vento.

Saltos ocorrem quando a força de sustentação é maior que a soma das forças de gravidade da partícula e a força de adesão, quando existente. Depois da suspensão, a força de gravidade passa a ser mais importante que a força de sustentação. Desse modo, o voo da partícula é interrompido e ela retorna à superfície. O destino dessa partícula pode ser: e se comportar como uma partícula sujeita a outros saltos ou integrar o grupo de partículas na superfície. Uma partícula em voo pode perturbar a superfície durante seu ricocheteio e causar suspensão de outras partículas. Assim como na suspensão modificada, o salto modificado é causado por partículas ligeiramente mais pesadas, em relação às partículas que estão sujeitas à suspensão pura.

Rolamento é o terceiro modo de transporte das partículas e ocorrem se a densidade do fluido é muito menor que a das partículas. Assim, se as partículas são muito pesadas para serem suspensas, elas rolam ou escorregam ao longo da superfície sob o efeito de forças aerodinâmicas. Esse fenômeno geralmente ocorre como resultado do impacto das partículas que estão sujeitas ao fenômeno físico de salto. O *momentum* fornecido para as partículas em rolamento pelo impacto das partículas em salto é grande o bastante para que elas rolem, mas não para que suspendam. Também vale ressaltar que uma partícula em rolamento pode transferir *momentum* para outras partículas.

Importantes parâmetros auxiliam na definição e entendimento dos fenômenos de suspensão, salto e rolamento. Entre eles têm-se a escala de tempo das menores escalas – Kolmogorov (τ_l) (JIMÉNEZ, 2004), definida pela Eq. 3-1, e a escala de tempo das maiores escalas (τ_L), segundo Eq. 3-2.

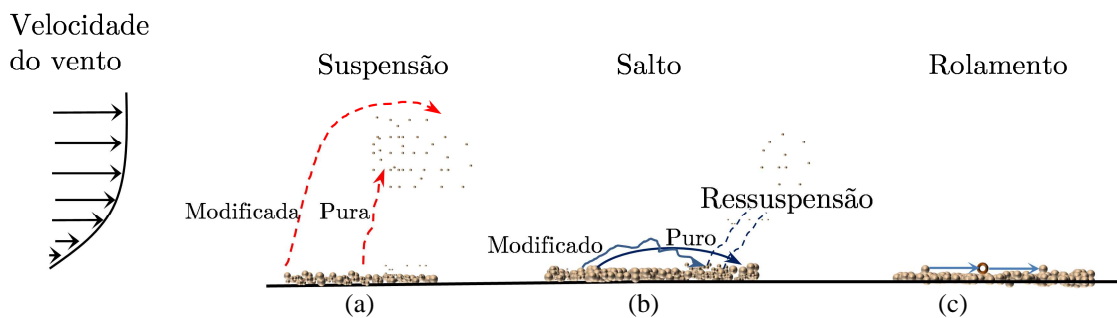


Figura 3.2: Três modos de transporte das partículas devido ao efeito da erosão eólica: (a) suspensão, (b) salto e (c) rolamento. Adaptado de Duran *et al.* (2011).

A ordem de grandeza das variáveis envolvidas nos fenômenos físicos, como a erosão eólica em partículas de pilhas de granulados, caracteriza o comportamento global das partículas em escoamentos turbulentos. São parâmetros importantes da partícula o número de Stokes e gravidade, e do escoamento as escalas de turbulência. Assim, as características do transporte por saltos e suspensão podem ser representadas por relações entre esses parâmetros. Dentro desse contexto, o tempo de relaxação (tempo necessário para uma partícula se ajustar aos novos balanços de forças quando inserido no escoamento) também é utilizado para representar os fenômenos denominados suspensão, salto e rolamento.

Esses fenômenos são caracterizados por um parâmetro adimensional que relaciona a razão entre escalas de tempo de relaxação da partícula (τ_p), das menores escalas de turbulência (τ_l) e das maiores escalas de turbulência (τ_L) e relações que caracterizam a trajetória da partícula (Tanière *et al.*, 1997), chamado Número de Stokes (S_t).

O tempo de relaxação da partícula, conforme Eq. 3-3, é dependente do parâmetro denominado Fator de Correção de Cunningham (Eq. 3-4). O objetivo desse fator é corrigir a força de arraste, quando o número de *Knudsen* da partícula (Eq. 3-6), que representa a medida da relação do caminho livre médio entre as moléculas do fluido e o raio da partícula, é menor ou igual à unidade.

Assim, analisando o número de Stokes (S_t), tem-se: Se $S_{t_l} = \tau_p/\tau_l \ll 1$, as velocidades do fluido e da partícula são similares e caracteriza suspensão pura. Se $S_{t_L} = \tau_p/\tau_L \gg 1$, a partícula não é influenciada pela turbulência e ocorre o fenômeno de salto puro.

Em alguns casos, as partículas são influenciadas por ambos os efeitos (turbulência e inércia). Se os efeitos da colisão com a superfície sólida são significativos, ocorrem saltos modificados e se os efeitos da turbulência são significativos ocorre suspensão modificada. A definição da ocorrência desses fenômenos é determinada pela razão entre a velocidade de deposição gravitacional da partícula e o valor da flutuação vertical de velocidade do escoamento do fluido. Se este parâmetro, denominado trajetória cruzada da partícula, P_{tc} , conforme Yudine (1959), representada na Eq. 3-7, for maior que a unidade, ocorre salto modificado, caso contrário, ocorre suspensão modificada.

Ainda na Eq. 3-4, os valores de A_1 , A_2 e A_3 são obtidos experimentalmente e valem, para o ar, 1,257, 0,4 e 0,55, respectivamente. Observando que o termo exponencial é um valor desprezível para partículas muito pequenas, chega-se à Eq. 3-5. Para o cálculo de K_n , o valor

do caminho livre médio (λ) é igual a 0,065 μm para uma temperatura de 25° C e pressão de 1 atm (SEINFELD & PANDIS, 2006, p. 399).

$$\tau_l \approx \left(\frac{\nu \delta}{(0,1U_\infty)^3} \right)^{1/2} \quad \text{Eq. 3-1}$$

$$\tau_L \approx \frac{\delta}{0,1U_\infty} \quad \text{Eq. 3-2}$$

$$\tau_p = \frac{\rho_p D_p^2 C_c}{18\mu} \quad \text{Eq. 3-3}$$

sendo

$$C_c = 1 + K_n (A_1 + A_2 e^{-A_3 d/\lambda}) \quad \text{Eq. 3-4}$$

$$C_c = 1 + 1,257 K_n \quad \text{Eq. 3-5}$$

$$K_n = \frac{2\lambda}{D_p} \quad \text{Eq. 3-6}$$

$$P_{tc} = v_g / v_f' \quad \text{Eq. 3-7}$$

$$v_g = g\tau_p \quad \text{Eq. 3-8}$$

sendo que τ_l e τ_L representam as escalas de tempo associadas às menores escalas (Kolmogorov) e maiores escalas de comprimento, respectivamente [s]; ν é a viscosidade cinemática do fluido [m^2s^{-1}]; U_∞ é a velocidade do fluido na corrente livre [ms^{-1}]; δ é a espessura da camada limite [m]; ρ_p – massa específica da partícula [kgm^{-3}]; D_p – diâmetro da partícula [m]; C_c – fator de correção de Cunningham; μ – viscosidade dinâmica do fluido [kgms^{-1}]; P_{tc} – Trajetória cruzada da partícula [-]; v_g – Velocidade de deposição gravitacional da partícula [ms^{-1}]; v_f' – flutuação vertical velocidade [ms^{-1}].

3.1.1.2 Erodibilidade de partículas

Um dos principais parâmetros que trata esse trabalho é a velocidade de fricção. Assim, mais detalhes serão fornecidos em seções que explicam o escoamento turbulento próximo à superfície (relacionando com a tensão de cisalhamento) e o modelo USEPA (relacionando com a velocidade na superfície da pilha). Por ora, é importante salientar que a velocidade de fricção tem um limiar, denominado velocidade de fricção limite (u_t^*), que é a velocidade de

fricção na qual a erosão se inicia e é uma função do tamanho da partícula e da umidade do material.

Uma partícula é erodível quando se desprende de um leito de partículas sob um evento de erosão do vento. A erodibilidade da partícula é verificada por meio da Figura 3.3, que representa uma curva relacionando a velocidade de fricção limite normalizada como uma função do diâmetro da partícula.

Bagnold (1941) propôs uma equação adimensional para relacionar a velocidade de escoamento do fluido e a granulometria da partícula. O autor demonstrou que para partículas com largas faixas granulométricas há um aumento da velocidade de fricção, o que indica menor quantidade de partículas emitidas. Os estudos de Iversen e White (1982) e Foucaut (1994) estabeleceram formulações associando valores adimensionais de velocidade de fricção e diâmetro da partícula. Foucaut (1994) determinou relações com dados experimentais e a correlação proposta por Iversen e White (1982). A suspensão da partícula segundo o critério de velocidade de fricção limite é apresentada por Iversen & White (1982). A Eq. 3-9 trata do diâmetro da partícula normalizado; a Eq. 3-10 apresenta a velocidade de fricção normalizada; Eq. 3-11 é o diâmetro da partícula de referência; Eq. 3-12 indica a velocidade de fricção de referência; Eq. 3-13 – gravidade aparente e Eq. 3-14 – velocidade de fricção limite de referência.

$$\widetilde{D}_p = \frac{D_p}{D_{pref}} \quad \text{Eq. 3-9}$$

$$\widetilde{u}^* = \frac{u^*}{u_{ref}^*} \quad \text{Eq. 3-10}$$

$$D_{pref} = \left(\frac{v^2}{\gamma_p} \right)^{\frac{1}{3}} \quad \text{Eq. 3-11}$$

$$u_{ref}^* = (\gamma_p v)^{\frac{1}{3}} \quad \text{Eq. 3-12}$$

$$\gamma_p = \frac{\rho_p g}{\rho_{ar}} \quad \text{Eq. 3-13}$$

$$\widetilde{u}_t^* = 22,71 \widetilde{D}_p^x + 10,23 \widetilde{D}_p^y - 32,5; \text{ sendo as potências: } x=0,043 \text{ e } y=-0,118 \quad \text{Eq. 3-14}$$

sendo D_p – diâmetro da partícula [m]; u^* – velocidade de fricção [ms^{-1}]; D_{pref} – diâmetro da partícula de referência [m]; u_{ref}^* – velocidade de fricção de referência [ms^{-1}]; v – viscosidade

cinemática do fluido [m^2s^{-1}]; γ_p – gravidade aparente [ms^{-2}]; ρ_p – densidade da partícula [kgm^{-3}]; ρ_{ar} – densidade do ar [kgm^{-3}]; g – aceleração da gravidade [ms^{-2}].

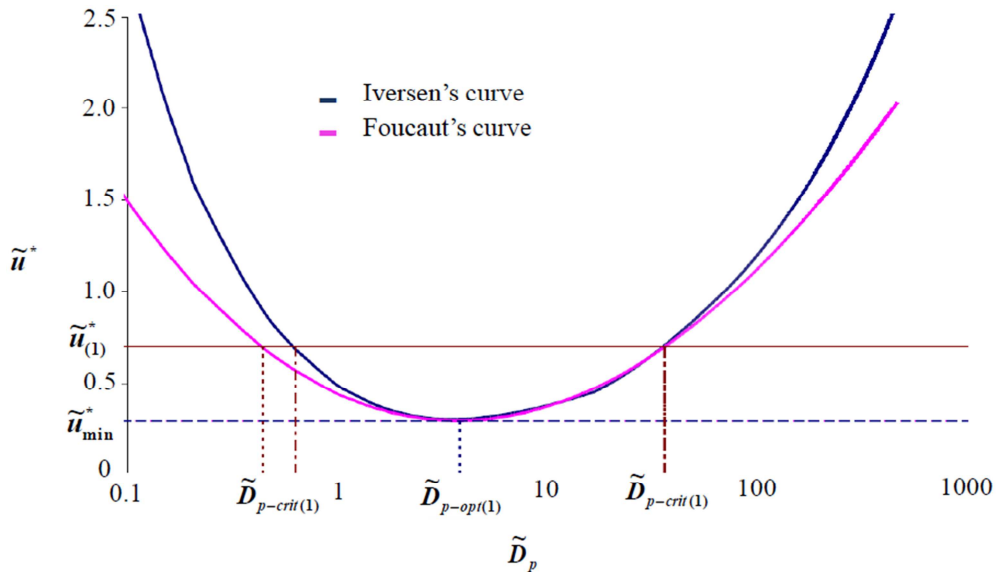


Figura 3.3 - Critérios de erodibilidade das partículas. Fonte: TURPIN (2010)

Após apresentação das Eq. 3-9 a Eq. 3-14, observa-se na Figura 3.3 os critérios de análise da erodibilidade de uma partícula, em que é possível associar a velocidade de fricção limite de um material com a sua granulometria. Para que as partículas sejam suspensas a Figura 3.3 determina as faixas de diâmetros das partículas erodíveis e não erodíveis, para uma determinada faixa de velocidade de fricção limite.

O menor valor da velocidade de fricção normalizada (\tilde{u}_{min}^*), representado pela linha tracejada em azul, corresponde à velocidade necessária para causar a suspensão da superfície das primeiras partículas. Existe uma faixa de diâmetros críticos ($\tilde{D}_{p-crit(1)}, \tilde{D}_{p-crit(2)}, \dots$) na qual as partículas são suspensas. Fora dessa faixa, as partículas repousam na superfície, causadas principalmente pelo peso de grandes partículas e alta força de adesão em relação às menores e mais leves.

Assim, é possível determinar as faixas de diâmetro das partículas erodíveis e não-erodíveis para uma dada velocidade limite de fricção (u_t^*), o que significa dizer que a partir de \tilde{u}_{t-min}^* , pode-se determinar a faixa de diâmetro (valores mínimo e máximo) na qual ocorrerá emissão, considerando velocidade de fricção adimensional igual a $\tilde{u}_{t(1)}^*$. Fora desta faixa, as partículas permanecerão na superfície devido ao seu peso e a força de adesão ou aderência entre as partículas menores (FOUCAUT, 1994).

A velocidade do vento está diretamente ligada à suspensão das partículas. Altas velocidades do vento podem causar suspensão das partículas da superfície e estão relacionadas a altos

níveis de turbulência os quais influenciam o transporte das partículas a longas distâncias. Esse transporte acontece em um escoamento turbulento e os modelos matemáticos do fenômeno da erosão eólica devem levar em conta os efeitos dessa turbulência.

3.1.1.3 Modelos de colisão de partículas

Quando uma partícula toca a superfície há uma troca de momento (Figura 3.4) e essa troca é definida como coeficiente de restituição, u_{in}^p é a velocidade de incidência, u_n^p e u_t^p são as velocidades normal e tangencial de incidência, e v_{reb}^p é a velocidade de ressuspensão, v_n^p e v_t^p são as velocidades normal e tangencial de ressuspensão da partícula. Ω_p e ω_p são as velocidades angulares de incidência e de ressuspensão, respectivamente.

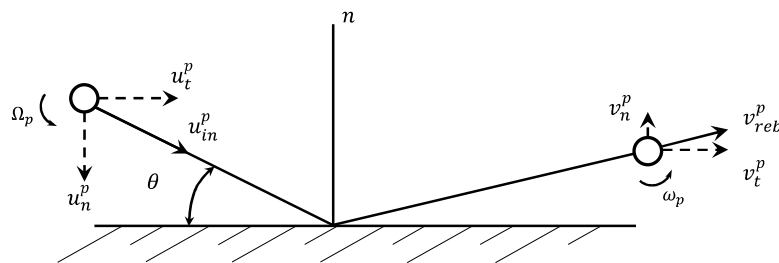


Figura 3.4 – Configuração de colisão partícula-solo. Fonte: Adaptado de Tain (2006).

Quando toca a superfície, uma partícula pode ficar retida na superfície ou ressuspender. Se a velocidade de incidência da partícula está abaixo de certo valor crítico, chamado de velocidade de captura, a partícula permanece na superfície. Se a velocidade incidente está acima de uma velocidade de captura, ela pode saltar, mas com certa perda de momentum. Vários parâmetros físicos governam o processo de colisão partícula-superfície. Entre esses parâmetros estão a velocidade incidente da partícula, a velocidade angular inicial, o ângulo incidente, o diâmetro e a superfície da partícula bem como as propriedades materiais. Outros parâmetros como as características e rugosidade da superfície podem também contribuir para significativa influência o impacto da partícula e ressuspensão dessa superfície (Li *et al.*, 2000; Sommerfeld, 1992). Muitos estudos experimentais e investigações computacionais foram conduzidos por Matsumoto & Saito (1970), Dahneke (1975), Sommerfeld (1992), Brach & Dunn (1992), Brach *et al.* (2000), Sommerfeld & Huber (1999). O sucesso na modelagem correta da colisão de partículas na parede permanece indefinido, devido à sua natureza complexa. Para escoamento gás-partícula, três categorias de colisão são utilizadas para modelos lagrangianos:

Na primeira categoria, os coeficientes normal (e_n) e tangencial (e_t) de restituição são assumidos ser constantes, conforme Eq. 3-15. Esse modelo é baseado nas leis da mecânica e na hipótese de que a área de contato entre a partícula e a superfície é tratada como um ponto. Também se assume que o coeficiente de restituição é uma constante e independe da velocidade de incidência da partícula, do ângulo de incidência e do material da superfície (TSIRKUNOV e PANFILOV, 1998).

$$e_n = -\frac{v_n^p}{u_n^p} = C_1; \quad e_t = -\frac{v_t^p}{u_t^p} = C_2; \quad \text{Eq. 3-15}$$

sendo v_n^p, v_t^p as velocidades normal e tangencial de ressuspensão da partícula; u_n^p, u_t^p representam as velocidades normal e tangencial incidente da partícula.

Assim, assume-se que não existe força tangencial agindo da parede na partícula. Quando um impacto perfeitamente elástico é assumido, os coeficientes de restituição normal e tangencial são assumidos ser 1(um). Esse tipo de modelo é fácil de entender e de ser implementado em códigos CFD (ANSYS FLUENT, 2013). Além disso, nenhum experimento é necessário para se obter os coeficientes de restituição.

Na segunda categoria, o modelo trata os valores dos coeficientes normal e tangencial de restituição como correlação dos ângulos de incidência (θ), conforme Eq. 3-16. Esse modelo é puramente empírico, uma vez que todos os parâmetros nas correlações são determinados por meio de experimentos e a ressuspensão das partículas é descrita em uma abordagem estatística. Grand e Tabakoff (1975) observaram isso com resultados de superfícies erodidas e partículas irregulares. A superfície apareceu com crateras após os experimentos. Além disso, após um pequeno período de tempo, um padrão de onda regular tomou forma na superfície erodida. A irregularidade da superfície da partícula também pode ter considerável influência no desempenho da ressuspensão. Contudo, este não está no foco de estudo deste trabalho, uma vez que as partículas são consideradas perfeitamente esféricas.

$$e_n = f_n(\theta); \quad e_t = f_t(\theta); \quad \text{Eq. 3-16}$$

Embora esse modelo de colisão não seja universalmente aplicável, ele tem sido largamente utilizado em investigações numéricas de escoamento de fluidos com partículas e erosão em superfícies em várias aplicações.

Na terceira categoria o coeficiente normal de restituição e o coeficiente de fricção (estático e dinâmico) são obtidos de experimentos e inclui uma série de equações que são baseadas no impulso da partícula e nas equações de momentum (Sommerfeld, 1992). Nesse modelo,

Grand e Tabakoff (1975) mediram parâmetros de restituição e erosão utilizando PIV (*Particles Image Velocimetry*). A média normal e tangencial dos coeficientes de restituição de partículas de 200 µm de quartzo chocando em uma superfície de alumínio foi estimada pelo Método dos Mínimos Quadrados para curvas polinomiais, conforme Eq. 3-17 e Eq. 3-18, onde θ é o ângulo de incidência da partícula.

$$e_n = -\frac{v_n^p}{u_n^p} = 0,993 - 1,76\theta + 1,56\theta^2 - 0,49\theta^3 \quad \text{Eq. 3-17}$$

$$e_t = -\frac{v_t^p}{u_t^p} = 0,988 - 1,66\theta + 2,11\theta^2 - 0,67\theta^3 \quad \text{Eq. 3-18}$$

3.1.2 *Escoamento de fluidos – abordagem euleriana*

No escoamento de ar na atmosfera, a camada limite pode ser afetada pelo gradiente de pressão, tridimensionalidade do escoamento, rugosidade na superfície, ou por combinações destas perturbações, de onde se observa que, se uma camada limite sujeita a estas perturbações, é uma camada limite em não equilíbrio. Uma camada limite em não equilíbrio está sujeita a alterações rápidas na direção de escoamento e alguma parte ou toda a camada limite não pode ser descrita apenas pelas condições locais, e mostram alguma dependência das condições a montante, bem como dependência de escalas adicionais de comprimento e velocidade.

Uma das principais características da turbulência é a tridimensionalidade. Uma camada limite turbulenta tridimensional é aquela em que a direção do vetor velocidade média varia com a distância à parede. Isto ocorre com muita frequência na prática, entre outras aplicações, em torno de obstáculos. Escoamentos ao redor de obstáculos são normalmente o resultado de um gradiente de pressão transversal, que tem um maior tempo para agir no fluido de baixa quantidade de movimento nas proximidades da superfície sólida, comparado com o fluido de grande quantidade de movimento na região afastada da superfície sólida. Usando o sistema de coordenadas cartesiano, mantendo a componente longitudinal da velocidade u alinhada com a corrente livre e a componente vertical v na direção normal à parede, a tridimensionalidade constitui uma componente média w que é nula na parede e na corrente livre, mas atinge o valor máximo nas proximidades da parede. Esta situação introduz vorticidade na direção do escoamento e uma tensão de Reynolds vw importante (BORGES, 2007).

Conforme já comentado nessa seção, a turbulência é um fenômeno de alta complexidade, sendo tridimensional, dependente do tempo e caracterizado por processos não lineares de

troca de massa, energia e quantidade de movimento, e que se dá via interações entre estruturas das mais variadas escalas de tempo e comprimento.

As equações de conservação (Eq. 3-19 a Eq. 3-25), mesmo após simplificações não tem solução analítica, sendo necessária solução numérica, que envolve a discretização no espaço e no tempo das variáveis de interesse. As equações que governam o escoamento de fluido na sua forma completa são escritas abaixo:

Equação da Conservação de Massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i)}{\partial x_i} = 0 \quad \text{Eq. 3-19}$$

Equação da Conservação da Quantidade de Movimento

$$\frac{\partial(\rho U_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i U_j)}{\partial x_j} = -\rho \delta_{3i} g - 2\rho \varepsilon_{ijk} \Omega_j U_k - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad \text{Eq. 3-20}$$

I II III IV V VI

$$\tau_{ij} = 2\mu S_{ij} - \left(p_m + \frac{2}{3}\mu \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad \text{Eq. 3-21}$$

$$p_m = p - \lambda \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \quad \text{Eq. 3-22}$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad \text{Eq. 3-23}$$

Equação da Conservação de Energia

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i h)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k_c \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \Phi + \left(\frac{\partial p}{\partial t} + U_i \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) + H \quad \text{Eq. 3-24}$$

onde para um gás perfeito:

$$\frac{\partial h}{\partial x_i} = c_p \frac{\partial T}{\partial x_i}$$

Equação da Conservação de Massa da Espécie Química

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i \omega)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_m \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right) + M \quad \text{Eq. 3-25}$$

Sendo t o tempo [s]; ρ é a massa específica do fluido [kgm^{-3}]; U_i, U_j, U_k são as componentes instantâneas das velocidades nas direções i, j e k , respectivamente [ms^{-1}]; x_i, x_j, x_k identificam as coordenadas nas direções i, j e k , respectivamente [m]; δ_{ij}, δ_{3i} representam o Delta de Kronecker; g é a aceleração da gravidade [ms^{-2}]; λ é a viscosidade de bulk ou segundo coeficiente de viscosidade [$\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$]; Ω_j – vetor velocidade angular na direção j [s^{-1}]; p_m – Pressão mecânica [Nm^{-2}]; p – pressão termodinâmica [Nm^{-2}]; τ_{ij} – tensor das tensões [Nm^{-2}]; μ – viscosidade molecular do fluido [$\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$]; S_{ij} – tensor taxa de deformação [s^{-1}]; c_p – calor específico do ar à pressão constante [$\text{m}^2\text{s}^{-2}\text{K}^{-1}$]; h – entalpia [m^2s^{-2}]; T – temperatura [K]; k_c – condutividade térmica do ar [$\text{kgmK}^{-1}\text{s}^{-3}$]; ω – concentração do contaminante, em [kgkg^{-1}]; D_m – difusividade de massa [m^2s^{-1}]; Φ – dissipação viscosa da energia [$\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-3}$]; H – termo de fonte de energia [$\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-3}$]; M – termo de fonte de massa [$\text{kgs}^{-1}\text{m}^{-3}$]; σ_t – constante empírica.

$$\varepsilon_{ijk} - \text{Símbolo de Levi-Civita ou tensor alternado. } \varepsilon_{ijk} = \begin{cases} +1, \text{ se } (i, j, k) = (1, 2, 3); (3, 1, 2); (2, 3, 1); \\ -1, \text{ se } (i, j, k) = (1, 3, 2); (3, 2, 1); (2, 1, 3); \\ 0, \text{ se } i = j \text{ ou } j = k \text{ ou } i = k; \end{cases}$$

As equações de conservação podem ser simplificadas com o objetivo de facilitar tanto a análise teórica quanto a computação numérica. Para o escoamento atmosférico, um parâmetro importante é a condição de estabilidade da atmosfera, que pode ser definida como sendo a sua capacidade de resistir ou intensificar os movimentos verticais. A estabilidade atmosférica pode se avaliada com base no gradiente de temperatura potencial. Se o gradiente de temperatura potencial for positivo, as condições atmosféricas são ditas estáveis e os movimentos verticais suprimidos. Por outro lado, se o gradiente for negativo, a atmosfera é dita instável e os movimentos verticais são intensificados. Caso o gradiente seja nulo os movimentos não são suprimidos nem intensificados e a atmosfera é dita neutra. Nas condições de atmosfera neutra, a Eq. 3-24 não é necessária. O Anexo I demonstra as equações da variação da temperatura com a altitude e a sua relação com a temperatura potencial, para justificar a mudança das variáveis $T \rightarrow \theta$ na Eq. 3-24.

Outra simplificação possível consiste na solução do escoamento atmosférico limitado à microescala, em que não é considerada a força de Coriolis (termo IV da Eq. 3-20) (SEINFELD & PANDIS, 2006). Outra maneira de se observar a importância da força de Coriolis é por meio do número de Rossby, que relaciona as forças de inércia e as forças de Coriolis, conforme Eq. 3-26:

$$Ro = U/Lf \quad \text{Eq. 3-26}$$

sendo U a escala de velocidade, L a escala horizontal de comprimento e f a frequência de Coriolis, dado pela Eq. 3-27:

$$f = 2\Omega \sin\phi \quad \text{Eq. 3-27}$$

sendo Ω a frequência angular da rotação planetária e ϕ a latitude. Valores de ordem de grandeza menores que a unidade para o Número de Rossby indica que o sistema é fortemente afetado pelas forças de Coriolis. Nesse estudo os números de Rossby são da ordem de 3×10^4 ($U \approx 8 \text{ m/s}$, $L \approx 5 \text{ m}$ e $f = 4,9 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$), confirmando que os efeitos da força de Coriolis podem ser desprezados.

No escoamento atmosférico, usualmente o fluido é considerado incompressível e a viscosidade constante, $\partial U_k / \partial x_k = 0$ e $\lambda = 0$, respectivamente. Essas simplificações ocorrem devido aos efeitos dos dois termos serem considerados apenas para fluidos compressíveis e somente quando há mudanças bruscas de densidade, como no interior de ondas de choque ou sobre escalas de tempo muito pequenas, como em ultrassom com alta intensidade.

Um tratamento possível nos cálculos das concentrações dos poluentes em relação às equações de conservação é a abordagem lagrangiana. Nesse caso, uma vez que haja um tratamento alternativo na análise da concentração, é possível desprezar a equação da conservação da massa da espécie química (Eq. 3-25). Sendo assim, as equações podem ser restritas conforme abaixo:

$$\frac{\partial(\rho U_i)}{\partial x_i} = 0 \quad \text{Eq. 3-28}$$

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i U_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \rho g \delta_{3i} \quad \text{Eq. 3-29}$$

sendo

$$\tau_{ij} = 2\mu S_{ij} - \left(p_m + \frac{2}{3}\mu \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad \text{Eq. 3-30}$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad \text{Eq. 3-31}$$

A turbulência nos fluidos é um fenômeno de alta complexidade, sendo tridimensional e dependente do tempo, sendo caracterizado por processos não lineares de troca de massa, energia e quantidade de movimento, o que se dá via interações entre estruturas das mais variadas escalas de tempo e de comprimento. As equações de conservação como estão representadas, mesmo após simplificações não tem solução analítica, sendo necessária solução numérica, que envolve a discretização no espaço e no tempo. Para a descrição dos escoamentos turbulentos, três possibilidades estão disponíveis:

- Simulação numérica direta (DNS): a DNS resolve diretamente a partir das equações de conservação todas as escalas da turbulência;
- Simulação de grandes escalas (LES): resolve diretamente as grandes escalas e modela as pequenas escalas do escoamento turbulento.
- Modelos baseados nas equações médias de Reynolds (RANS): modela todas as escalas da turbulência baseando-se nas equações médias de Reynolds;

A Simulação numérica direta é a técnica ideal, pois resolve diretamente todas as escalas do escoamento com a resolução no nível das escalas de Kolmogorov (JIMÉNEZ, 2004). Entretanto, nessa revisão serão descritos apenas os modelos baseados em RANS e LES que serão utilizados nesse trabalho.

Os modelos baseados na técnica RANS modelam todas as escalas do escoamento e os modelos baseados em LES, as grandes escalas do escoamento turbulento são resolvidas diretamente e as pequenas escalas são modeladas através de um modelo de submalha. LES tem a ideia de médias no tempo. Um filtro no espaço é aplicado às equações de conservação e a solução computacional é obtida de forma transiente. Essa característica dos modelos LES é um dos grandes atrativos do uso dessa técnica na modelagem da turbulência.

Do ponto de vista do espectro de energia, LES calcula diretamente as maiores escalas, partindo de um valor dentro da faixa inercial até as grandes escalas, enquanto os modelos RANS modelam todo o espectro. Essa observação pode ser vista na Figura 3.5 (a) e (b).

Conforme já dito, DNS utiliza malha fina o suficiente para resolver toda a física envolvida no fenômeno, ou seja, todos os graus de liberdade e todo o processo de interação não linear entre eles. Um grau de liberdade equivale a uma equação linear discretizada, e um fenômeno com número de Reynolds (Re) igual a 10^4 forneceria, via DNS, aproximadamente 130 milhões de equações (WILCOX, 2006), tornando inviável em relação aos recursos computacionais vigentes, ainda que o avanço nessa área tenha sido notável. Ressalta-se ainda que esse Re não é suficientemente alto para representar problemas envolvendo escoamentos atmosféricos.

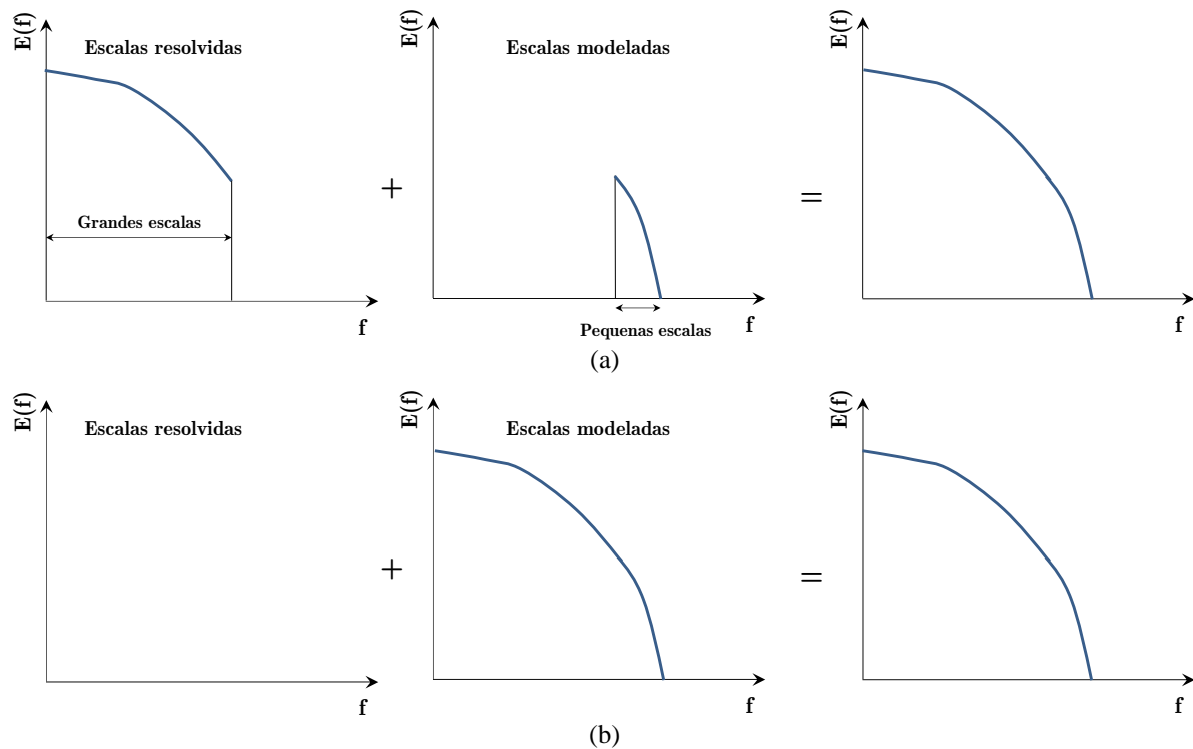


Figura 3.5 – a) Representação esquemática da decomposição do espectro de energia em escalas resolvidas e modeladas segundo LES; b) Representação esquemática da decomposição do espectro de energia em escalas resolvidas e modeladas segundo RANS.

3.1.2.1 Modelos baseados em RANS

Devido a presente limitação para solução de problemas de escoamentos turbulentos, pois uma abordagem completamente determinística não é possível, um tratamento estatístico foi proposto por Osborne Reynolds em 1895. Esse tratamento consiste na aplicação da decomposição das propriedades envolvidas, na forma de valores médios e suas flutuações (Figura 3.6), nas equações de conservação da quantidade de movimento, daí o nome *Reynolds Averaging Navier-Stokes* (RANS). O valor instantâneo da velocidade é representado, ou de qualquer variável escalar genérica ϕ da seguinte forma, respectivamente:

$$U_i = \bar{U}_i + u'_i \quad \text{Eq. 3-32}$$

$$\phi_i = \bar{\phi}_i + \phi'_i \quad \text{Eq. 3-33}$$

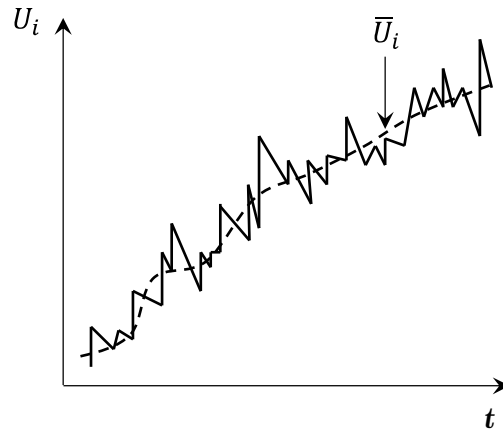


Figura 3.6 – Representação esquemática da variação randômica da velocidade em torno da média. Fonte: Adaptado de Santos(2000).

Após a substituição de todas as variáveis nas equações de conservação pelas suas quantidades médias mais flutuações, as equações são integradas em um intervalo de tempo Δt . Na teoria, esse intervalo de tempo deve ser infinito, entretanto Δt é apenas grande o suficiente para que exceda as escalas de tempo das variações de mais baixa frequência (grandes escalas). Esta definição é adequada apenas para a condição de turbulência estacionária (escoamentos em regime permanente). Em escoamentos transientes a variável em um tempo t é tomada como sendo a média de um grande número de experimentos idênticos que é denominada média das repetições (*ensemble average*).

Outra aproximação possível é a da aproximação de Boussinesq, de modo que a densidade seja apenas uma função da temperatura e não da pressão, ou seja, a densidade só irá variar com a temperatura, e a influência da variação da densidade só será importante nos termos de empuxo da equação de momento. Consequentemente, a densidade é considerada constante e igual a ρ_0 (valor de referência), e então o último termo da Eq. 3-29 é substituído por $-\delta\bar{\rho}g$, onde $\delta\bar{\rho}$ indica a variação da densidade em relação ao estado de referência ($\delta\bar{\rho} = \bar{\rho} - \rho_0$).

Para escrever as equações de conservação em termos de quantidades médias, as considerações são: escoamento permanente e incompressível, as propriedades μ , k_c , c_p e D_m são constantes, a dissipação viscosa na equação de conservação da energia é negligenciada e não existe fonte de energia.

$$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_i} = 0 \quad \text{Eq. 3-34}$$

$$\frac{\partial (\bar{U}_i \bar{U}_j)}{\partial x_i} + \frac{\partial (\overline{u'_i u'_j})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[- \left(\frac{\bar{p}}{\rho_0} + \frac{2}{3} \frac{\mu}{\rho_0} \frac{\partial \bar{U}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} + 2 \frac{\mu}{\rho_0} \bar{S}_{ij} \right] - \frac{\delta \bar{\rho}}{\rho_0} g \delta_{3j} \quad \text{Eq. 3-35}$$

sendo

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) \quad \text{Eq. 3-36}$$

e

$$-\left(\frac{\bar{p}}{\rho_0} + \frac{2}{3} \frac{\mu}{\rho_0} \frac{\partial \bar{U}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} + 2 \frac{\mu}{\rho_0} \bar{S}_{ij} = \tau_{ij} \quad \text{Eq. 3-37}$$

$$-\overline{u'_i u'_j} = \tau_{ij}^{turb} \quad \text{Eq. 3-38}$$

O termo adicional que aparece na equação da quantidade de movimento (τ_{ij}^{turb}) é conhecido como tensor das tensões de Reynolds. Na forma matricial:

$$\tau_{ij}^{turb} = - \begin{bmatrix} \overline{u'_1 u'_1} & \overline{u'_1 u'_2} & \overline{u'_1 u'_3} \\ \overline{u'_2 u'_1} & \overline{u'_2 u'_2} & \overline{u'_2 u'_3} \\ \overline{u'_3 u'_1} & \overline{u'_3 u'_2} & \overline{u'_3 u'_3} \end{bmatrix} \quad \text{Eq. 3-39}$$

No Tensor de Reynolds, os elementos da diagonal ($i=j$) representam os componentes de tensão normal e os elementos fora da diagonal representam as tensões cisalhantes. O processo de tomada da média de Reynolds nas equações de conservação faz, portanto, aparecerem correlações envolvendo flutuações da velocidade na equação do movimento médio. Dessa forma, o problema da modelagem da turbulência é reduzido ao cálculo do tensor das tensões de Reynolds e dos outros fluxos turbulentos.

Após a integração média de Reynolds, existem mais variáveis do que equações. As equações para a quantidade física de velocidade são definidas, mas não existem equações para os fluxos turbulentos. É, então, necessário, providenciar um novo conjunto de equações que relacione as grandezas médias às grandezas instantâneas. Esse procedimento de obtenção de novas relações funcionais que completem a formulação do problema é chamado, em turbulência, de “problema do fechamento”. Dessa forma, torna-se necessário utilizar apenas um número finito de equações e aproximar as variáveis desconhecidas em termos de quantidades conhecidas. Quando os termos de segunda ordem são aproximados, através de valores calculados das primeiras equações, o fechamento é denominado fechamento de primeira ordem. De forma análoga, se são desenvolvidas equações de transporte para calcular os termos de segunda ordem, surgem termos desconhecidos de terceira ordem, que são aproximados através dos valores calculados nas equações de primeira e segunda ordem. Neste caso, o fechamento é dito de segunda ordem.

Existem várias formas de modelar os termos que surgem da integração proposta pelas equações médias de Reynolds. Uma dessas classes de modelos muito utilizada é denominada modelos das tensões de Reynolds baseado na equação de ω . Segundo Wilcox (2006), pode-se utilizar uma equação para a taxa de dissipação específica da turbulência ω , escrita na forma $\omega = \varepsilon/\kappa$. Esta quantidade tem dimensão de $[t^{-1}]$. Uma das variantes desse modelo é o κ - ω SST, desenvolvido por Menter (1994) como uma mistura das formulações do modelo κ - ω para as regiões próximas à parede com a independência do modelo κ - ε na superfície livre. Para isso, uma função ponderada assume valor 1 (um) próximo à parede, de modo a ativar o modelo κ - ω , e 0 (zero) afastado da parede, fazendo com que seja ativado o modelo κ - ε . As equações do modelo de turbulência κ - ω SST² (Menter, 1994) são as equações de momentum, representadas pelo transporte de energia cinética (κ) (Eq. 3-40), e dissipação (ε), denominado de (ω), conforme Eq. 3-41:

$$\frac{\partial(\rho\kappa)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\kappa u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\kappa \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right) + \tilde{G}_\kappa - Y_\kappa \quad \text{Eq. 3-40}$$

$$\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\omega u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\omega \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right) + G_\omega - Y_\omega + D_\omega \quad \text{Eq. 3-41}$$

\tilde{G}_κ representa a geração de energia cinética turbulenta devido a gradientes de velocidade média (Eq. 3-42), calculado a partir da versão original do modelo κ - ω (Wilcox, 2006), conforme Eq. 3-45. G_ω representa a geração de ω (Eq. 3-49), Γ_κ e Γ_ω são a difusividade de κ e ω , respectivamente (Eq. 3-43); Y_κ e Y_ω são a dissipação de κ (Eq. 3-50) e ω (Eq. 3-53), respectivamente, devido à turbulência. D_ω é o tensor difusivo cruzado, conforme Eq. 3-58.

$$\tilde{G}_\kappa = \min(G_k, 10\rho\beta^*\kappa\omega) \quad \text{Eq. 3-42}$$

$$\Gamma_k = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}; \Gamma_\omega = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \quad \text{Eq. 3-43}$$

$$\mu_t = \frac{\rho\kappa}{\omega} \frac{1}{\max\left[\frac{1}{\alpha^*}, \frac{SF_2}{a_1\omega}\right]} \quad \text{Eq. 3-44}$$

$$G_k = \mu_t S^2 \quad \text{Eq. 3-45}$$

$$\sigma_k = \frac{1}{F_1/\sigma_{k,1} + (1 - F_1)/\sigma_{k,2}} \quad \text{Eq. 3-46}$$

² SST – *Shear Stress Transport*

$$\sigma_\omega = \frac{1}{F_1/\sigma_{\omega,1} + (1 - F_1)/\sigma_{\omega,2}} \quad \text{Eq. 3-47}$$

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad \text{Eq. 3-48}$$

$$G_\omega = \alpha \frac{\omega}{\kappa} G_\kappa \quad \text{Eq. 3-49}$$

$$Y_\kappa = \rho \beta^* f_\beta \kappa \omega \quad \text{Eq. 3-50}$$

$$f_\beta = \begin{cases} 1, & \text{se } \chi_\kappa \leq 0 \\ \frac{1 + 680\chi_\kappa^2}{1 + 400\chi_\kappa^2}, & \text{se } \chi_\kappa \geq 0 \end{cases} \quad \text{Eq. 3-51}$$

$$\chi_\kappa = \frac{1}{\omega^3} \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \quad \text{Eq. 3-52}$$

$$Y_\omega = \rho \beta_i f_\beta \omega^2 \quad \text{Eq. 3-53}$$

$$f_\beta = \begin{cases} 1 + 70\chi_\omega \\ 1 + 80\chi_\omega \end{cases} \quad \text{Eq. 3-54}$$

$$\beta_i = F_1 \beta_{i,1} + (1 - F_1) \beta_{i,2} \quad \text{Eq. 3-55}$$

$$\chi_\omega = \left| \frac{\Omega_{ij} \Omega_{jk} S_{ki}}{(\beta_\infty^* \omega)^3} \right| \quad \text{Eq. 3-56}$$

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad \text{Eq. 3-57}$$

$$D_\omega = 2(1 - F_1) \rho \frac{1}{\omega \sigma_{\omega,2}} \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \quad \text{Eq. 3-58}$$

$$F_1 = \tanh(\Phi_1^4) \quad \text{Eq. 3-59}$$

$$\Phi_1 = \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{\kappa}}{0,09\omega y}, \frac{500\mu}{\rho y^2 \omega} \right), \frac{4\rho\kappa}{\sigma_{\omega,2} D_\omega^+ y^2} \right] \quad \text{Eq. 3-60}$$

$$D_\omega^+ = \max \left[2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega,2}} \frac{1}{\omega} \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, 10^{-10} \right] \quad \text{Eq. 3-61}$$

$$F_2 = \tanh(\Phi_2^2) \quad \text{Eq. 3-62}$$

$$\Phi_2 = \max \left[2 \frac{\sqrt{\kappa}}{0,09\omega y}, \frac{500\mu}{\rho y^2 \omega} \right] \quad \text{Eq. 3-63}$$

σ_κ e σ_ω representam os números de Prandtl turbulento para κ e ω , calculado conforme Eq. 3-46 e Eq. 3-47, respectivamente; μ_t é a viscosidade turbulenta, calculada conforme Eq. 3-44. F_1 e F_2 são as funções de “mistura” entre os modelos, conforme Eq. 3-54 e Eq. 3-59, y é a distância mais próxima à superfície e D_ω^+ é a parte positiva do termo de difusão cruzada.

3.1.2.2 Escoamento turbulento próximo à superfície

O efeito das paredes no escoamento de fluidos está relacionado ao amortecimento da turbulência. Por exemplo, a suspensão e ressuspensão de partículas erodíveis e não erodíveis em pilhas de estocagem. Nessas regiões normalmente existe um gradiente acentuado das variáveis de escoamento, levando a maiores tensões normais e cisalhantes quando comparadas a regiões distantes da parede. Devido a essas grandes tensões nas regiões próximas à parede, o transporte e a geração de turbulência também são afetados, uma vez que envolve uma rápida mudança nas escalas de comprimento e de tempo turbulentos.

No movimento de um fluido acima da superfície, a influência da viscosidade é principalmente confinada à subcamada laminar. A Figura 3.7 reflete uma típica camada limite e o envolvimento com a parede, onde δ é a espessura da camada limite, U é a velocidade do fluido na superfície livre onde a tensão de cisalhamento é igual a zero.

Assim, há similaridade geométrica que é mantida, independente do número de Reynolds do escoamento ou da velocidade de fricção local da superfície. No caso da camada limite que envolve turbulência, não há variável adimensional y que leve à representação completa do perfil de velocidade por uma curva, devido a dois fatores: (i) dependência do perfil com a viscosidade (análise é efetuada próxima à superfície); (ii) dependência do tensor de Reynolds que requer diferentes escalas de comprimento. Por essa razão, é importante o tratamento da camada limite turbulenta como uma composição de camadas internas e externas.

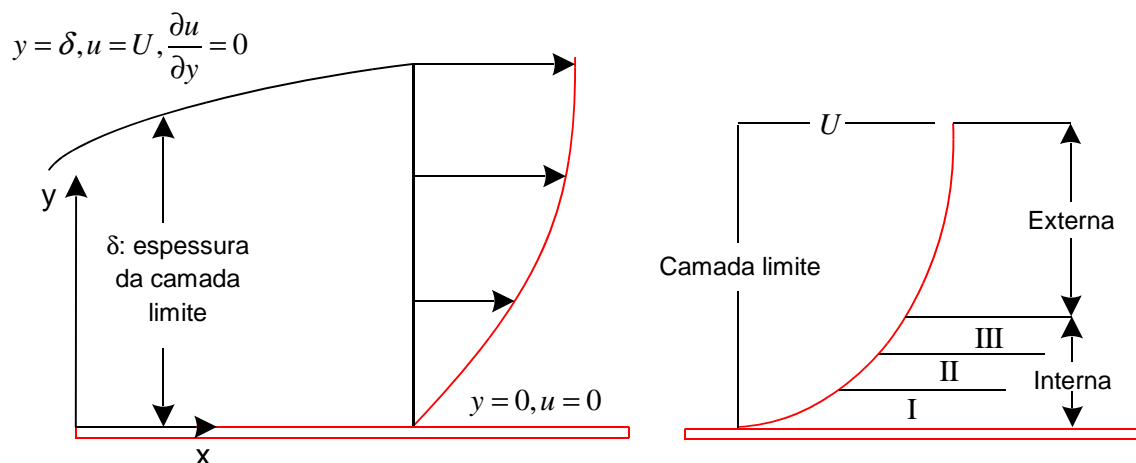


Figura 3.7– Representação esquemática da camada limite, destacando a parede e o perfil de velocidade logarítmico. Fonte: Adaptado de JIANG e LAI (2009).

Observa-se que a velocidade muda rapidamente de zero próximo à parede (condição de não deslizamento) até a velocidade de superfície livre. Estudos experimentais de turbulência

envolvendo paredes sólidas sugerem que a camada interna está localizada no intervalo $0 < y < 0,2\delta$, e a camada externa, $y \geq 0,2\delta$.

A distribuição de velocidade média próxima à parede pode ser avaliada através de análise dimensional, denominada lei da parede, e afirma que a velocidade adimensional u^+ pode ser definida pela Eq. 3-64, enquanto a distância adimensional à parede, y^+ , pela Eq. 3-65 (LUDWIEG e TILLMAN, 1950).

$$u^+ = \frac{\bar{u}}{u^*} \quad \text{Eq. 3-64}$$

$$y^+ = \frac{y \cdot u^*}{\nu} \quad \text{Eq. 3-65}$$

sendo \bar{u} a velocidade média do escoamento [ms^{-1}]; y – distância à parede [m]; ν – viscosidade cinemática do fluido [m^2s^{-1}]; u^* é a velocidade de fricção [ms^{-1}] (Eq. 3-66):

$$u^* = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad \text{Eq. 3-66}$$

τ_w – Tensão de cisalhamento na parede [Nm^{-2}];

Na região da subcamada laminar os efeitos viscosos se sobressaem em relação aos efeitos da turbulência. Para cada região da subcamada laminar é assumida uma expressão: (i) subcamada viscosa (Região I da Figura 3.7) pela Eq. 3-67; (ii) camada logarítmica de amortecimento (Região II da Figura 3.7) pela Eq. 3-68; (iii) camada externa logarítmica (Região III da Figura 3.7) representada pela Eq. 3-69.

$$u^+ = y^+ \quad 0 < y^+ < 5 \quad \text{Eq. 3-67}$$

$$u^+ = A \ln(y^+) + B \quad 5 \leq y^+ < 30; A = 5,0; B = -3,05 \quad \text{Eq. 3-68}$$

$$u^+ = A \ln(y^+) + B \quad 30 \leq y^+ < 500; A = 2,5; B = 5,1 \quad \text{Eq. 3-69}$$

Outra representação gráfica que relaciona a variável u^+ com a variável y^+ é feita através da Figura 3.8, inicialmente apresentada por Ludwig e Tillmann (1950) e também publicada em trabalhos de Clauser (1954). O perfil de u^+ em função de y^+ apresenta três regiões típicas: A primeira região na Figura 3.8 é a subcamada viscosa, na qual os efeitos da viscosidade são consideravelmente mais fortes que os efeitos turbulentos. Além disso, a relação entre u^+ e y^+ tem a forma de um perfil linear: $u^+ = y^+$.

A segunda região é zona intermediária, chamada zona de transição (camada amortecedora), entre o perfil linear e o perfil logarítmico. A última região da Figura 3.8 representa o perfil logarítmico (Eq. 3-68). Finalmente, após a região de perfil logarítmico tem-se a região em que o escoamento entra na região da esteira turbulenta (camada externa). O perfil de velocidade para parede completamente lisa é dado pela Eq. 3-70:

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + C \quad \text{Eq. 3-70}$$

sendo κ a constante de von Kármán ($\kappa \approx 0,4$) e $C=5,45$.

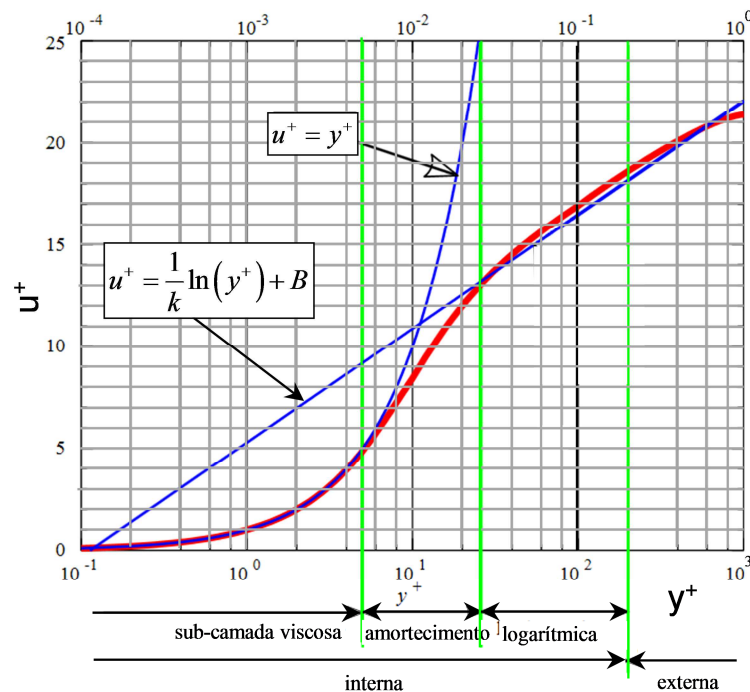


Figura 3.8 – Representação esquemática da parede com a relação entre o perfil de velocidade logarítmico. Fonte: Adaptado de: Nezu e Tominaga (2000) e Cebeci e Cousteix (2005, pag. 166).

A presença de rugosidade impacta significativamente as propriedades turbulentas do escoamento. Para paredes rugosas, o efeito mais importante sobre as propriedades do escoamento é o aumento da velocidade de fricção. O principal efeito da rugosidade é o aumento da turbulência próximo à parede e a redução da velocidade média na zona exterior à camada limite turbulenta.

Uma característica importante é a mudança do perfil logarítmico, conforme Figura 3.9, que mostra um deslocamento entre o perfil logarítmico com parede lisa e o perfil real (Δu^+). Essa relação entre os dois perfis é representado por um parâmetro denominado altura de rugosidade (h_s). Diversos trabalhos estudam as características desse parâmetro, como por exemplo, Clauser (1954), Shao (2008) e Gillette *et al.* (1998).

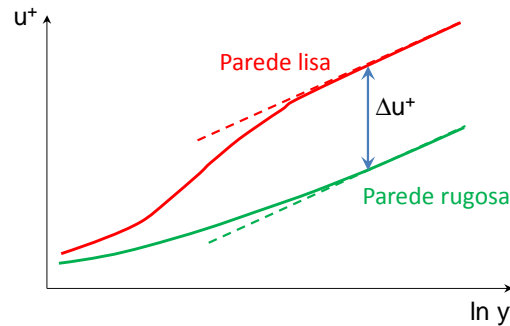


Figura 3.9 – Deslocamento na zona de perfil logarítmico devido à parede rugosa. Fonte: Adaptado de Furieri (2012).

O deslocamento entre o perfil logarítmico e o perfil real é dado pela Eq. 3-71:

$$\Delta u^+(h_s^+) = \frac{1}{\kappa} \ln(h_s^+) - B \quad \text{Eq. 3-71}$$

sendo

$$h_s^+ = \frac{h_s u^*}{\nu} \quad \text{Eq. 3-72}$$

onde $B = 2.98$, u^* é a velocidade de fricção e h_s é a altura média dos elementos rugosos.

Assim, o perfil de velocidade na zona logarítmica para um fluido sobre uma parede rugosa pode ser descrito como um parâmetro de altura de rugosidade (Eq. 3-73), baseada em Eq. 3-70 e Eq. 3-71:

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(y/h_s) + C + B \quad \text{Eq. 3-73}$$

sendo B dependente do regime de escoamento e da rugosidade.

Muitos escoamentos de interesse prático poderiam ser apontados como escoamentos onde os fenômenos descritos anteriormente coexistem. Um escoamento importante dentre as diversas aplicações existentes na engenharia é o escoamento atmosférico ao redor de obstáculos. Dentro desse contexto, muitos problemas podem ser estudados, como o comportamento da pluma de poluente sob a influência do obstáculo e a dispersão de material particulado de uma pilha de estocagem.

3.1.2.3 Escoamento e dispersão ao redor de obstáculos

O escoamento na atmosfera se desenvolve, em geral, em regime turbulento, principalmente os escoamentos ao redor de obstáculos. O escoamento ao redor de obstáculos apresenta fenômenos de natureza complexa, com regiões de intensa recirculação e movimentos

turbulentos, fortemente tridimensionais e anisotrópicos (Murakami, 1993), representando um grande desafio para modelos matemáticos de descrição da turbulência (Santos, 2000). A complexidade das estruturas do escoamento geradas pela presença do obstáculo exige que a solução numérica do escoamento e do campo de concentração, seja obtida a partir de modelos sofisticados que descrevem de forma mais precisa as estruturas de fluxo que ocorrem no escoamento.

Conforme reportado por Blocken *et al.* (2013), uma precisa solução da distribuição de concentração de contaminantes é uma tarefa difícil, especialmente em ambientes próximos a obstáculos. Isso requer conhecimento de meteorologia e dispersão da poluição do ar, aerodinâmica dos obstáculos devido ao escoamento incidente no obstáculo, uma vez que esses são alguns dos fatores que afetam o comportamento da pluma. Alguns parâmetros importantes para a dispersão em torno dos obstáculos são a geometria do obstáculo, topografia, velocidade e direção do vento e turbulência.

A complexidade das estruturas do escoamento, geradas pela presença do obstáculo, exige que a solução numérica do escoamento e do campo de concentração seja obtida a partir de modelos sofisticados que descrevem de forma mais precisa as estruturas de fluxo que ocorrem no escoamento. Essas estruturas complexas são verificadas na Figura 3.10. Pode-se notar que as regiões importantes para descrever o escoamento ao redor de obstáculos cúbicos são claramente distintas.

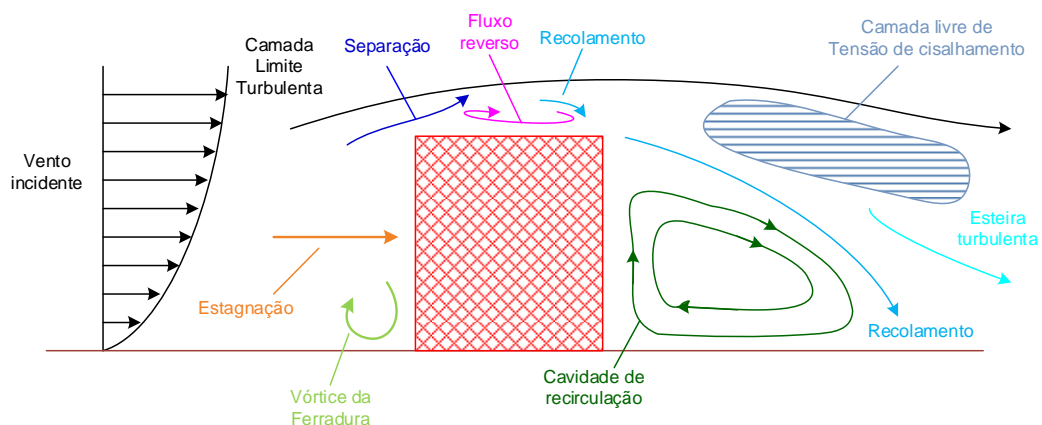


Figura 3.10 – Representação esquemática do escoamento ao redor de um prédio cúbico – vista do plano central. Fonte: Adaptado de Murakami (1993).

A Figura 3.10 apresenta um corte no plano central do escoamento. Observa-se que as estruturas representativas do escoamento incidente são devidas à presença do prédio, acontecendo nesse ponto a região de estagnação. A combinação entre a vorticidade e a distribuição de pressões na parede frontal do prédio resulta na alteração do escoamento, gerando uma região de fluxo descendente próximo ao chão. Consequentemente, essa alteração

do escoamento conduz à separação do escoamento e geração de um vórtice, conhecido como vórtice da ferradura. O vórtice primário induz à formação de outros vórtices menores, que são incorporados ao vórtice primário ao longo das laterais do prédio.

No teto e laterais do prédio ocorrem regiões onde o escoamento tem sentido contrário ao sentido do escoamento principal. Neste caso, o escoamento é então separado. Um aspecto importante no escoamento ao redor de prédios é a localização do ponto onde, após a separação, o escoamento passa a se movimentar todo no mesmo sentido. Esse ponto é denominado ponto de recolamento. O recolamento ocorre de forma distinta no teto e laterais do prédio e após o prédio em toda a linha de recolamento. Essa linha define a cavidade de recirculação, que ocorre após o prédio desde a parede posterior.

Após passar pelo prédio, o escoamento requer algum tempo para recuperar as características do perfil de vento incidente. Esse perfil só é restabelecido com o desaparecimento de todas as perturbações causadas pelo prédio. A região mais afastada do prédio, onde ainda persistem alguns efeitos das perturbações, é denominada esteira turbulenta. A esteira turbulenta, quando comparada à região do perfil de vento incidente, possui menor velocidade média e maior intensidade de turbulência (CEZANA, 2007).

Na Figura 3.11 pode-se ver em perspectiva o escoamento ao redor de um obstáculo cúbico, com as estruturas de fluxo indicadas. Observam-se as regiões descritas anteriormente: a região do vento incidente, as zonas de fluxo reverso no teto e laterais do prédio, as linhas de separação no teto e paredes laterais, a zona de recirculação atrás do prédio, o vórtice da ferradura e a esteira turbulenta na região mais afastada do prédio.

Assim, com a alteração do padrão de escoamento ao redor de um obstáculo, o fenômeno da dispersão de poluentes na região de vizinhança desse obstáculo também é alterado. O comportamento da dispersão de poluentes na região que está próxima ao obstáculo depende da forma do obstáculo, da região onde o poluente é lançado e das condições atmosféricas.

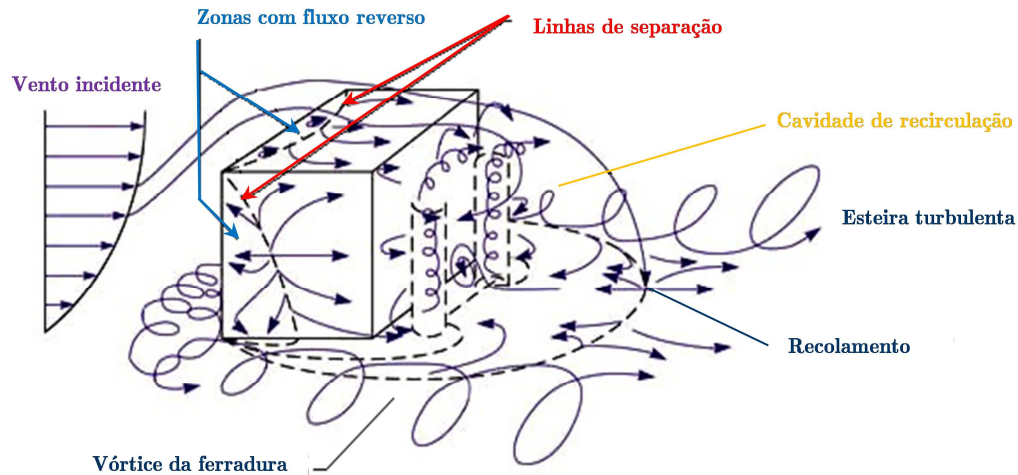


Figura 3.11 - Estruturas típicas do escoamento ao redor de um obstáculo cúbico – perspectiva tridimensional. Fonte: Adaptado de Hosker (1980).

Diversos trabalhos complementam os estudos de escoamento ao redor de obstáculos, ao fazer a análise de escoamento incidente em pilhas de estocagem de granulados, como por exemplo, Badr e Harion (2005, 2007), Toraño et al. (2009) e Turpin (2010), Furieri *et al.* (2013). A Figura 3.12 apresenta os resultados das simulações numéricas de uma pilha cujo escoamento incidente está a 90°. Turpin (2010) também desenvolveu experimentos em túnel de vento utilizando PIV de modo a validar os resultados numéricos.

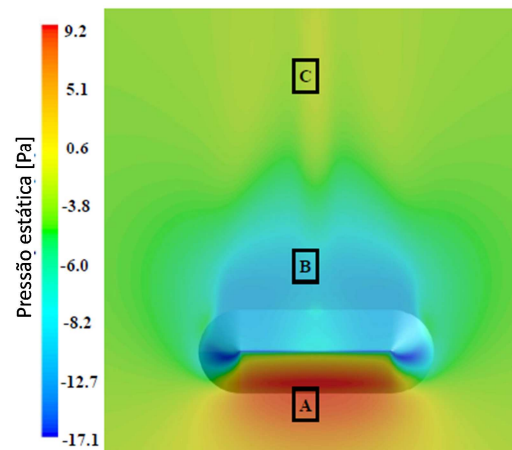


Figura 3.12 - Simulação numérica do escoamento ao redor de uma pilha de estocagem perpendicular à direção principal do vento: Visualização da pressão estática na superfície e no entorno da pilha. Fonte: Adaptado de Turpin (2010).

A Figura 3.12 mostra os contornos da pressão estática na superfície sólida no solo e na superfície da pilha. Três regiões podem ser observadas: (A) Região de escoamento incidente, onde os altos níveis de pressão (zona de estagnação) estão presentes; (B) Zona de recirculação após a pilha, onde os níveis de baixa pressão são observados; (C) Zona de esteira turbulenta. A zona de recirculação é uma região de transição entre as regiões B e C.

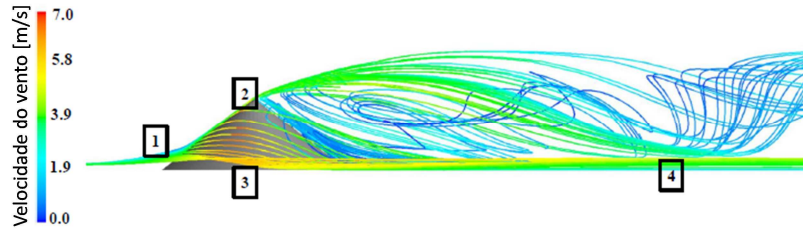


Figura 3.13 – Trajetórias de partículas fluidas liberadas de posições anteriores ao obstáculo. Adaptado de Turpin (2010)

A Figura 3.13 apresenta trajetórias de partículas fluidas após incidência do vento, representando uma visão lateral das pilhas com quatro propriedades similares ao escoamento ao redor de obstáculo cúbico isolado: (1) região incidente; (2) escoamento em torno do topo da pilha; (3) escoamento nas superfícies laterais da pilha, caracterizado por uma representação similar ao vórtice da ferradura que aparecem nos escoamentos ao redor de obstáculos cúbicos, além de zona de descolamento; (4) Zona de recirculação.

Essa seção mostrou que o fenômeno do escoamento de dispersão de poluentes ao redor de obstáculos é complexo e, portanto exige a utilização de técnicas sofisticadas de modelagem para correto tratamento dos efeitos da turbulência no escoamento e como consequência, para o tratamento desses efeitos no cálculo das concentrações de contaminantes.

3.1.2.4 Modelos baseados em LES

Nos modelos de turbulência LES (*Large Eddy Simulation*), as estruturas turbulentas transportadoras de massa e quantidade de movimento são resolvidas diretamente da solução das equações filtradas, enquanto as menores estruturas são modeladas.

O campo das grandes escalas ou o campo resolvido é essencialmente uma média local do campo completo, sendo mais bem definido por meio da função filtro ou peso. Em LES, define-se uma operação de filtragem espacial por meio de uma função filtro $G(x, x', \Delta)$, conforme Eq. 3-74 (VERSTEEG & MALALASEKERA, 2007, pág. 99):

$$\widehat{\phi}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, x', \Delta) \phi(x', t) dx'_1 dx'_2 dx'_3 \quad \text{Eq. 3-74}$$

sendo que $\widehat{\phi}(x, t)$ é a função filtrada; $\phi(x, t)$ é a função original (não filtrada); $\phi(x', t)$ é a função representada na nova coordenada x' , onde as integrais são calculadas; Δ é o comprimento de corte do filtro; x' representa a coordenada onde as operações envolvendo os integrandos no espaço são calculadas para cada tempo t .

A função filtro é um corte no espaço físico utilizado nas simulações baseadas em volumes finitos. Quando a largura da banda do filtro utilizado é igual a da malha de discretização, o processo de filtragem confunde-se com o próprio processo de discretização utilizado no método dos volumes finitos, desde que, no interior do volume de discretização, as variáveis sejam supostas constantes. A definição do filtro de corte no espaço físico utilizado no método dos volumes finitos para o filtro *Top-hat* ou filtro de Box é apresentada na Eq. 3-75:

$$G(x, x', \Delta) = \begin{cases} 1/\Delta^3 & |x - x'| \leq \Delta/2 \\ 0 & |x - x'| > \Delta/2 \end{cases} \quad \text{Eq. 3-75}$$

Conforme Versteeg & Malalasekera (2007), o objetivo da largura de corte do filtro é indicar que vórtices serão retidos nos cálculos das simulações e que vórtices serão rejeitados. Em princípio, pode-se escolher uma largura de corte de qualquer tamanho, mas em CFD, ao utilizar o método dos volumes finitos não tem sentido selecionar um filtro menor que o tamanho do grid computacional. A solução mais comum é considerar a largura do filtro da mesma ordem de grandeza do tamanho do grid. O ideal é que a diferença entre os tamanhos da maior e menor largura do filtro sejam menores que 20% (CFX 13, 2010). Em problemas tridimensionais com células de tamanhos Δx , Δy e Δz a largura do filtro é calculado segundo a Eq. 3-76:

$$\Delta = \sqrt[3]{\Delta x \Delta y \Delta z} \quad \text{Eq. 3-76}$$

O filtro $G(x, x', \Delta)$ tem as seguintes propriedades, representadas por Eq. 3-77, Eq. 3-78, Eq. 3-79 e Eq. 3-80:

$$(a) \quad G(-x, x', \Delta) = G(x, x', \Delta) \quad \text{Eq. 3-77}$$

$$(b) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, x', \Delta) dx = 1 \quad \text{Eq. 3-78}$$

$$(c) \quad G(x, x', \Delta) \rightarrow 0, \text{ quando } |x| \rightarrow \infty \quad \text{Eq. 3-79}$$

$$(d) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, x', \Delta) x^n dx \text{ existe para todo } n \geq 0 \quad \text{Eq. 3-80}$$

Assume-se que o sistema que envolve o problema de interesse se comporta como linear, contínuo e invariante no tempo, com sinal de entrada $\phi(x', t)$ e de saída $\hat{\phi}(x, t)$, descrito pela

integral de convolução representada pela Eq. 3-74. O sinal $\phi(x, t)$ conhecido, é a resposta do sistema a uma unidade de impulso. Para calcular a saída de $\phi(x, t)$ no tempo t , primeiro o integrando $G(x, x', \Delta)\phi(x', t)$ é calculado como uma função da nova coordenada x' . Depois a integral tripla é calculada, resultando na propriedade filtrada $\widehat{\phi}(x, t)$.

A parte filtrada da função, $\widehat{\phi}(x, t)$, é a variável que representa a propriedade na equação de governo. Na verdade, ao se realizar a operação de filtragem, divide-se o campo do escoamento turbulento em grandes estruturas ou grandes escalas, $\phi(x, t)$, e pequenas estruturas, $\phi'(x, t)$, que correspondem às escalas de submalha. Deste modo, uma escala de comprimento de corte Δ pode ser escolhida, de tal modo que todas as flutuações nas escalas maiores que Δ serão resolvidas e as escalas remanescentes que constituem as flutuações das menores escalas serão descartadas. Assim, os efeitos das flutuações das menores escalas sobre o campo resolvido, os chamados grandes turbilhões, deverão ser modelados. Tipicamente, Δ é uma escala de comprimento característico das menores estruturas de interesse no escoamento.

3.1.2.4.1 Equações filtradas

O processo de filtragem consiste na imposição da função descrita na Eq. 3-74 às equações de conservação. Através do processo de filtragem, as equações de conservação da massa e quantidade de movimento apresentam a forma da Eq. 3-81 e Eq. 3-82, respectivamente. O símbolo $\widehat{}$ indica que a propriedade em evidência está sendo filtrada.

$$\frac{\partial \widehat{U}_i}{\partial x_i} = 0 \quad \text{Eq. 3-81}$$

$$\frac{\partial \widehat{U}_i}{\partial t} + \frac{\partial \widehat{U}_i \widehat{U}_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \widehat{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu}{\rho} \frac{\partial \widehat{U}_i}{\partial x_j} \right] \quad \text{Eq. 3-82}$$

Diante da dificuldade de representação de termos tais como $\widehat{U}_i \widehat{U}_j$, que se apresenta na forma de produtos filtrados, não é possível a solução imediata do sistema de equações. Assim, os termos são decompostos através de $U_i = \widehat{U}_i + u'_i$, resultando na Eq. 3-83:

$$\widehat{U}_i \widehat{U}_j = \underbrace{\widehat{U}_i \widehat{U}_j}_I + \underbrace{\widehat{U}_i' \widehat{U}_j + \widehat{U}_i \widehat{U}_j'}_{II} + \underbrace{\widehat{U}_i' \widehat{U}_j'}_{III} \quad \text{Eq. 3-83}$$

Como (I) é dependente das grandes escalas, o termo pode ser calculado; (II) é o tensor cruzado (C_{ij}) e (III) é o tensor análogo ao tensor das tensões de Reynolds (R_{ij}) . As componentes das escalas residuais (u'_i) são modeladas.

Com o objetivo de não incrementar o grau de complexidade das equações de transporte e eliminar o processo de filtragem de um produto no termo convectivo, Leonard (1974) definiu mais um tensor, o tensor de Leonard, $L_{ij} = \left(\widehat{\widehat{U_i U_j}} - \widehat{U_i} \widehat{U_j} \right)$. Daí pode-se, então, reescrever a Eq. 3-83 na forma da Eq. 3-84:

$$\widehat{U_i U_j} = \widehat{U_i} \widehat{U_j} + L_{ij} + C_{ij} + R_{ij} \quad \text{Eq. 3-84}$$

Assim, ao inserir os efeitos da decomposição nas equações de conservação da quantidade de movimento filtradas, obtém-se a Eq. 3-85:

$$\frac{\partial \widehat{U_i}}{\partial t} + \frac{\partial \widehat{U_i} \widehat{U_j}}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \widehat{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu}{\rho} \frac{\partial \widehat{U_i}}{\partial x_j} + \tau_{ij}^s \right] \quad \text{Eq. 3-85}$$

onde τ_{ij}^s é o tensor de Reynolds de submalha, definido pela Eq. 3-86:

$$\tau_{ij}^s = \left(\widehat{U_i U_j} - \widehat{U_i} \widehat{U_j} \right) = L_{ij} + C_{ij} + R_{ij} \quad \text{Eq. 3-86}$$

Como apresentado na Eq. 3-83, existem termos que são resolvidos diretamente (\widehat{U}), enquanto os termos residuais na forma que compõe o tensor das tensões de Reynolds são modelados por meio de um modelo de submalha, utilizando o conceito de viscosidade turbulenta, conforme Eq. 3-87 (já mostrada na Eq. 3-30):

$$-\tau_{ij}^s = \mu_t \left(\frac{\partial \widehat{U_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widehat{U_j}}{\partial x_i} \right) = 2\mu_t \widehat{S_{ij}} \quad \text{Eq. 3-87}$$

3.1.2.4.2 Modelos de escala de submalha

Conforme já mencionado, o escoamento das grandes escalas é resolvido diretamente nos modelos de turbulência LES e a influência das pequenas escalas são levadas em conta pelos apropriados modelos de escala de submalha. A viscosidade turbulenta (μ_t) é relacionada às tensões de escala de submalha por meio da Eq. 3-87. Existem diversas maneiras de determinar o seu valor, entre eles o modelo LES *Smagorinsky* (SMAGORINSKY, 1963), LES *Smagorinsky* Dinâmico (GERMANO *et al.*, 1991), LES WALE (NICOU & DUCROS, 1999), LES modelado na parede (KIM & MENON, 1997).

Modelo LES Smagorinsky

O modelo Smagorinsky é um modelo algébrico para o cálculo da viscosidade turbulenta da escala de submalha, μ_{sgs} , expressa através de análise dimensional (Eq. 3-88):

$$\mu_{sgs} \propto l q_{sgs} \quad \text{Eq. 3-88}$$

sendo l a escala de comprimento não resolvida, normalmente representada pelo próprio filtro de comprimento de escala das dimensões da malha empregada (Δ); q_{sgs} é a escala de velocidade não resolvida.

Baseado na analogia do modelo do comprimento de mistura, a escala de velocidade está relacionada aos gradientes da velocidade filtrada (Eq. 3-89):

$$q_{sgs} = \Delta |\hat{S}|; \text{ onde } |\hat{S}| = (2\widehat{S_{ij}S_{ij}})^{1/2} \quad \text{Eq. 3-89}$$

Assim, o modelo Smagorinsky de viscosidade turbulenta para o modelo de escala de submalha está representado na Eq. 3-90:

$$\mu_{sgs} = (C_s \Delta)^2 |\hat{S}| \quad \text{Eq. 3-90}$$

sendo C_s um parâmetro empírico constante.

Para o caso de turbulência isotrópica, com espectro de alcance inercial, o valor do espector de energia é dependente do valor de C_k , calculado conforme Eq. 3-91:

$$E(k) = C_k \varepsilon^{2/3} \kappa^{-5/3} \quad \text{Eq. 3-91}$$

sendo

$$C_s = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2}{3C_k} \right)^{3/4} = 0,18 \quad \text{Eq. 3-92}$$

Segundo Arya (1999, p. 251), o valor desse parâmetro é igual a 0,2 para o caso de métodos numéricos livres de erros de difusão numérica e condições de estabilidade neutra. Já em CFX 13 (2010), os valores mudam dependendo do tipo de escoamento e da resolução da malha e podem variar entre 0,065 (escoamento em canais) até 0,25. Destas observações, vê-se que o valor de C_s não é uma constante universal, sendo esse parâmetro uma séria deficiência do modelo. Além disso, funções de amortecimento são necessárias para tratamento próximo à parede, caso contrário pode ser reproduzidos valores elevados da viscosidade turbulenta próxima à superfície (TUTAR e OGUZ, 2002). Observa-se também que tanto a escala de comprimento quanto a escala de velocidades são predefinidas, uma vez que o modelo não considera as propriedades locais do escoamento, o que pode causar outro problema para o caso de domínios em geometrias complexas, onde o escoamento experimenta significativas mudanças no espaço.

Próximo à superfície, a viscosidade turbulenta pode ser tratada por meio de uma combinação de mínimo comprimento de mistura e função de amortecimento f_μ (Eq. 3-93):

$$\mu_{sgs} = \min \left(l_{mix}, f_\mu C_s \Delta \right)^2 \sqrt{S_{ij} S_{ij}} \quad \text{Eq. 3-93}$$

sendo

$$l_{mix} = \kappa y_{wall} \quad \text{Eq. 3-94}$$

C_s e κ (constante de *von Kármán*) têm valores de 0,1 e 0,4, respectivamente. Também por default, a função de amortecimento f_μ é 1,0 (CFX 13, 2010). Outras funções de amortecimento que podem ser utilizadas são as de Van Driest e de Piomelli. A função de Van Driest é modelada através da Eq. 3-95 (Van DRIEST, 1956):

$$f_\mu = 1 - e^{-(y^+/A)} \quad \text{Eq. 3-95}$$

Para o caso Piomelli, a representação é feita pela Eq. 3-96 (PIOMELLI, 2008):

$$f_\mu = \sqrt{1 - e^{-(y^+/A)^3}} \quad \text{Eq. 3-96}$$

sendo para ambas as funções a constante $A=25$.

Modelo LES Smagorinsky Dinâmico

Germano *et al.* (1991) e Lilly (1992) introduziram um método para avaliar os coeficientes de escala da submalha utilizando as informações contidas no campo de velocidade turbulenta resolvida, com o objetivo de sanar as deficiências do modelo Smagorinsky, pois permite variar C_s no espaço e tempo, deixando de ser uma constante para se ajustar automaticamente ao tipo de escoamento.

O conceito do procedimento dinâmico é aplicar um segundo filtro, chamado filtro de teste para as equações de movimento. O novo filtro de largura Δ^t é igual a duas vezes a largura do filtro de malha Δ^r . Assim o escoamento do campo resolvido é feito por meio de ambos os filtros. A diferença entre os dois campos resolvidos é a contribuição das pequenas escalas cuja largura está entre o filtro da malha e o filtro de teste. A informação relacionada a essas escalas é utilizada para calcular a constante do modelo (ANSYS FLUENT, 2013).

O cálculo do valor de C_s é feito localmente em cada passo de tempo baseado na dupla filtragem das variáveis de escoamento, representados pelos sobrescritos r e t . O desenvolvimento do modelo se inicia pela chamada identidade de Germano (Eq. 3-97):

$$L_{ij} = T_{ij} - \tau_{ij}^r \quad \text{Eq. 3-97}$$

sendo τ_{ij}^r o tensor de submalha na escala Δ^r e T_{ij} o tensor de submalha na escala Δ^t , conforme Eq. 3-98 e Eq. 3-99:

$$\tau_{ij}^r = (U_i U_j)^r - U_i^r U_j^r \quad \text{Eq. 3-98}$$

$$T_{ij} = (U_i U_j)^t - U_i^t U_j^t \quad \text{Eq. 3-99}$$

Ambos, T_{ij} e τ_{ij}^r são modelados do mesmo modo que o modelo Smagorinsky e o sobrescrito ^t denota o filtro de teste, sendo $\Delta^t = 2\Delta^r$. O tensor de Leonard, L_{ij} , é representado pela Eq. 3-100:

$$L_{ij} = (U_i^r U_j^r)^t - U_i^{rt} U_j^{rt} \quad \text{Eq. 3-100}$$

Nesse contexto, com a aplicação do modelo Smagorinsky para T_{ij} e τ_{ij} , é possível calcular o valor dinâmico local de C_s (agora denominado C_d), conforme Eq. 3-101 e Eq. 3-102:

$$\tau_{ij} - \frac{\delta_{ij} \tau_{kk}}{3} = C_d (-2(\Delta^r)^2 |S_{ij}^r| S_{ij}^r) = C_d M_{ij}^r \quad \text{Eq. 3-101}$$

$$T_{ij} - \frac{\delta_{ij} \tau_{kk}}{3} = C_d (-2(\Delta^t)^2 |S_{ij}^t| S_{ij}^t) = C_d M_{ij}^t \quad \text{Eq. 3-102}$$

A Eq. 3-103 é obtida através da identidade de Germano:

$$L_{ij}^a = L_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} L_{kk} = C_d M_{ij}^t - C_d M_{ij}^r \quad \text{Eq. 3-103}$$

O sistema de equações resultante é determinado e o coeficiente C_d surge dentro da operação de filtragem secundária. Para resolver o sistema de equações, um erro e_{ij} associado com o modelo Smagorinsky é definido segundo a Eq. 3-104:

$$e_{ij} = L_{ij}^a - C_d M_{ij}^t - C_d M_{ij}^r \quad \text{Eq. 3-104}$$

Lilly (1992) aplicou uma aproximação pelo método dos mínimos quadrados para minimizar o erro. O coeficiente C_d é, então, retirado do procedimento de filtragem, resultando na Eq. 3-105:

$$C_d = \frac{L_{ij}M_{ij}}{M_{ij}M_{ij}} \quad \text{Eq. 3-105}$$

onde

$$M_{ij} = M_{ij}^t - M_{ij}^r \quad \text{Eq. 3-106}$$

Utilizando o coeficiente C_d , a viscosidade turbulenta é obtida pela Eq. 3-107:

$$\mu_{sgs} = C_d \Delta^2 |\bar{S}_{ij}| \quad \text{Eq. 3-107}$$

O coeficiente C_d obtido do modelo dinâmico Smagorinsky-Lilly varia no tempo e no espaço sobre uma faixa bastante ampla. Para evitar instabilidade numérica, o coeficiente de relaxação de C_d no tempo é aplicado nos limites superior e inferior.

1 - Limite inferior, para evitar viscosidade negativa, conforme a Eq. 3-108:

$$C_d = \max(C_d, C_d^{min}); \quad C_d^{min} = 0,0 \quad \text{Eq. 3-108}$$

2 - Limite superior (Eq. 3-109):

$$C_d = \min(C_d, C_d^{max}) \quad \text{Eq. 3-109}$$

O valor de C_d^{max} varia entre 0.04 e 0.09 (CFX 13, 2010).

3 - Relaxação no tempo (Eq. 3-110):

$$\tilde{C}_d^n = \alpha C_d^n + (1 - \alpha) \tilde{C}_d^{n-1}, \text{ onde } \alpha = 0.01 \quad \text{Eq. 3-110}$$

O modelo proposto calcula a viscosidade turbulenta para refletir localmente o estado do escoamento, por meio de amostras das menores escalas resolvidas e utilizando essa informação para modelar as escalas da submalha. Com isso o modelo desempenha um apropriado comportamento assintótico próximo à parede ou em escoamento laminar, sem exigência de função de amortecimento. O modelo também é capaz de prever fluxo de energia das pequenas escalas para as grandes escalas (*backscatter*), o qual pode ser significativo. Outra característica importante é que o modelo tem valor zero quando L_{ij} desaparece, casos em que o escoamento é laminar ou em contornos sólidos. O único parâmetro ajustável no modelo é a razão representada pela Eq. 3-111:

$$\frac{\Delta^t}{\Delta^r} > 1 \quad \text{Eq. 3-111}$$

O cálculo das tensões turbulentas das escalas resolvidas utilizando pequenos valores dessa razão pode ser contaminado por erros numéricos. Por outro lado, valores grandes dessa razão podem indicar que as tensões devido às grandes estruturas que carregam a energia turbulenta estão sendo utilizadas para determinar a contribuição das escalas de submalha. Se um valor adequado dessa razão varia muito de um escoamento para outro, a aplicabilidade do modelo é reduzida (GERMANO *et al.*, 1991).

Modelo LES WALE (Wall-Adapted Local Eddy Viscosity Model)

O modelo de viscosidade turbulenta WALE é formulado segundo a Eq. 3-112 para calcular a viscosidade turbulenta:

$$\mu_{sgs} = (C_w \Delta)^2 \frac{(S_{ij}^d S_{ij}^d)^{3/2}}{(\bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij})^{5/2} + (S_{ij}^d S_{ij}^d)^{5/4}} \quad \text{Eq. 3-112}$$

$$S_{ij}^d = \frac{1}{2} [(\bar{g}_{ij})^2 + (\bar{g}_{ji})^2] - \frac{1}{3} \delta_{ij} (\bar{g}_{kk})^2 \quad \text{Eq. 3-113}$$

$$(\bar{g}_{ij})^2 = \bar{g}_{ik} \bar{g}_{kj} \quad \text{Eq. 3-114}$$

$$\bar{g}_{ij} = \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \quad \text{Eq. 3-115}$$

sendo \bar{g}_{ij} o tensor baseado no gradiente de velocidade; S_{ij}^d é o operador sem a barra representa a parte simétrica do quadrado do tensor do gradiente de velocidade. Mais detalhes do desenvolvimento do modelo WALE em Nicou & Ducros (1999).

A principal vantagem do modelo WALE é a capacidade de reproduzir a transição do escoamento laminar para turbulento, além de não necessitar de uma segunda filtragem, como no modelo Smagorinsky-Lilly Dinâmico. O valor de C_w encontrado em simulações com turbulência isotrópica foi igual a 0,5, enquanto em dutos resultados melhores foram encontrados com C_w igual a 0,4 (NICOUD & DUCROS, 1999; CFX 13, 2010).

Semelhante ao modelo Smagorinsky Dinâmico, o modelo de submalha WALE já é adaptado para representar corretamente a variação assintótica da viscosidade turbulenta da escala de submalha (μ_{sgs}) na distância y^+ e não necessita de função de amortecimento.

As vantagens do modelo são (NICOUD e DUCROS, 1999):

- ✓ Invariância na translação ou rotação das coordenadas;

- ✓ Facilidade de utilização em qualquer tipo de malha computacional;
- ✓ Calcula μ_{sgs} como função do tensor taxa de deformação e do tensor de rotação;
- ✓ A viscosidade turbulenta naturalmente tende a zero próximo à parede, visto que reproduz a condição de não deslizamento;
- ✓ Reprodução correta da variação assintótica da viscosidade turbulenta próxima à parede, uma vez que tem complexidade $O(y^3)$;
- ✓ Capacidade de reprodução da transição do regime laminar para turbulento;
- ✓ Não há necessidade de dupla filtragem. Assim, o esforço computacional é menor que o modelo Smagorinsky Dinâmico;

Modelo LES Algébrico modelado na superfície - Algebraic Wall-Modeled LES Model (WMLES)

Os modelos Smagorinsky e Smagorinsky-Lilly dinâmico discutidos previamente são essencialmente modelos algébricos nos quais as tensões de submalha são parametrizadas utilizando escalas resolvidas. A hipótese nesses modelos é a de equilíbrio local entre a energia transferida pela escala do filtro de submalha e a dissipação da energia cinética das pequenas escalas de submalha. No modelo WMLES (KIM & MENON, 1997), a turbulência na escala de submalha pode ser modelada levando-se em conta o transporte da energia cinética turbulenta da escala de submalha. A energia cinética turbulenta na submalha é definida pela Eq. 3-116:

$$k_{sgs} = \frac{1}{2}(\overline{u_k^2} - \bar{u}_k^2) \quad \text{Eq. 3-116}$$

o qual é obtida pelo ajuste do tensor das escalas de submalha, já representado na Eq. 3-86. A viscosidade turbulenta, μ_t , é calculada utilizando κ_{sgs} , conforme Eq. 3-117:

$$\mu_t = C_k \rho \kappa_{sgs}^{1/2} \Delta_f \quad \text{Eq. 3-117}$$

Δ_f é a largura do filtro, calculado por $\Delta_f = V^{1/3}$.

O tensor de submalha pode, então, ser escrito pela Eq. 3-118.

$$\tau_{ij} - \frac{2}{3} \rho \kappa_{sgs} \delta_{ij} = -2C_k \rho \kappa_{sgs}^{1/2} \Delta_f \bar{S}_{ij} \quad \text{Eq. 3-118}$$

κ_{sgs} é obtido pela solução da equação de transporte (Eq. 3-119):

$$\rho \frac{\partial \kappa_{sgs}}{\partial t} + \rho \frac{\partial \bar{u}_j \bar{\kappa}_{sgs}}{\partial x_j} = -\tau_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - C_\epsilon \rho \frac{\kappa_{sgs}^{3/2}}{\Delta_f} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \frac{\kappa_{sgs}}{\partial x_j} \right) \quad \text{Eq. 3-119}$$

sendo as constantes do modelo, C_k e C_ε calculadas dinamicamente e σ_k é igual a 1. Mais detalhes da implementação do modelo e sua validação estão em Kim (2004).

3.1.2.4.3 Condições de entrada para LES

Uma técnica utilizada para simular a condição de contorno na entrada do domínio para LES é a de síntese matemática. Nessa técnica há a geração das flutuações que se baseia no emprego de processos matemáticos não diretamente relacionados à turbulência, de modo a gerar um campo aleatório na entrada do domínio com propriedades similares à turbulência (Smirnov, Shi e Celik, 2001).

O método é denominado RFG (*Random Flow Generation*) e há uma geração randômica de escoamento que envolve operações de transformações ortogonais e escalares aplicadas ao campo de escoamento contínuo por meio de superposição de funções harmônicas. O procedimento consiste dos seguintes passos:

Passo 1 – Encontrar um tensor de transformação a_{ij} que diagonalize um dado tensor de velocidade anisotrópica r_{ij} , conforme Eq. 3-120 e Eq. 3-121:

$$a_{mi}a_{nj}r_{ij} = \delta_{mn}c_{(n)}^2 \quad \text{Eq. 3-120}$$

$$a_{ik}a_{kj} = \delta_{ij} \quad \text{Eq. 3-121}$$

sendo $r_{ij} \equiv \overline{\tilde{u}_i\tilde{u}_j}$ e $\{\tilde{u}_i(x_j, t)\}_{i,j=1,2,3}$

Assim, a_{ij} e c_n se tornam funções conhecidas no espaço. Os coeficientes $c_n = \{c_1, c_2, c_3\}$ fazem o papel das flutuações de velocidades (u', v', w') no novo sistema de coordenadas produzido pela transformação do tensor a_{ij} .

Passo 2 – Gerar um campo de escoamento transiente em um domínio tridimensional $\{\tilde{u}_i(x_j, t)\}_{i,j=1,2,3}$, utilizando o método de Kraichnan modificado (Kraichnan, 1970), Eq. 3-122:

$$v_i(\vec{x}, t) = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{n=1}^N [p_i^n \cos(\tilde{k}_j^n \tilde{x}_j + \omega_n \tilde{t}) + q_i^n \sin(\tilde{k}_j^n \tilde{x}_j + \omega_n \tilde{t})] \quad \text{Eq. 3-122}$$

sendo

$$\tilde{x}_j = \frac{x_j}{l}, \tilde{t} = \frac{t}{\tau}, c = \frac{l}{\tau}, \tilde{k}_j^n = k_j^n \frac{c}{c_{(j)}}, p_i^n = \varepsilon_{ijm} \zeta_j^n k_m^n, q_i^n = \varepsilon_{ijm} \xi_j^n k_m^n \quad \text{Eq. 3-123}$$

$$\zeta_j^n, \xi_j^n, \omega_n \in N(0,1), k_j^n \in N(0, 1/2)$$

l e τ as escalas de comprimento e de tempo de Kolmogorov; ε_{ijm} é o tensor permutação utilizado na operação e produto vetorial; $N(M, \sigma)$ representa a distribuição normal com média M e desvio-padrão σ ; k_j^n e ω_n representam uma amostragem dos números de onda n e frequência do espectro de turbulência modelado, o qual é expresso por (Eq. 3-124):

$$E(k) = 16 \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} k^4 \exp(-2k^2) \quad \text{Eq. 3-124}$$

Passo 3 – Aplicam-se uma transformação ortogonal e escalar ao campo de escoamento v_i gerado no passo anterior para obter um novo campo de escoamento u_i (Eq. 3-125 e Eq. 3-126):

$$w_i = c_{(i)} v_{(i)} \quad \text{Eq. 3-125}$$

$$u_i = a_{ik} w_k \quad \text{Eq. 3-126}$$

O procedimento acima utiliza como parâmetros de entrada o tensor do campo de escoamento r_{ij} e informações das escalas de comprimento e de tempo da turbulência (l, τ) . Essas quantidades podem ser obtidas de simulações RANS em regime permanente ou dados experimentais. O resultado do procedimento é um campo de escoamento dependente do tempo $u_i(x_j, t)$ com funções de correlação $\overline{u_i u_j}$ igual a r_{ij} e escalas de comprimento e de tempo de turbulência (l, τ) , respectivamente.

3.1.3 Modelagem da emissão de partículas

Quantidades relevantes de material particulado podem ser emitidas de movimentações mecânicas ou igualmente de eventos de erosão eólica naturais em pilhas de estocagem de material granulado. Muito esforço tem sido feito para quantificar e analisar a eficiência das técnicas de controle da poluição atmosférica em áreas de armazenamento e recuperação abertas de material granulado. Conforme Badr e Harion (2007), emissões de material particulado de fontes fugitivas de pilhas de áreas industriais e sua dispersão atmosférica têm trazido muitos problemas ambientais e econômicos.

A metodologia mais utilizada para o cálculo das emissões dessas partículas oriundas de fontes difusas é o modelo proposto por USEPA (USEPA 2006a, 2006b). Conforme já explicado, esse modelo é baseado no fator de emissão, que são valores representativos que relacionam a quantidade de poluente emitido para a atmosfera com a atividade associada com a emissão desse poluente. Esses fatores são usualmente expressos como um peso (massa) do poluente

dividido por dados de produção ou de insumos da atividade(peso, volume ou outras dimensões) ou duração da atividade que causa essa emissão. A estimativa de emissão é mostrada na Eq. 3-127:

$$E = A * EF * \left(1 - \frac{ER}{100}\right) \quad \text{Eq. 3-127}$$

sendo A taxa da atividade; EF é o Fator de Emissão; ER – Eficiência de redução global das emissões.

A metodologia de quantificação das emissões de pilhas de estocagem de material granulado é parte de um relatório específico (USEPA, 2006a, 2006b) e leva em consideração três fatores:

- Parâmetro associado ao tamanho aerodinâmico da partícula;
- Número de perturbações da pilha durante o período quando a estimativa da taxa de emissão é calculada;
- Potencial de erosão, associado à distribuição de velocidade 25 cm acima da superfície da pilha, perpendicular a essa superfície;

O fator de emissão (EF) para material particulado devido à erosão do vento de materiais que contenham superfícies erodíveis e não erodíveis é calculado segundo a Eq. 3-128:

$$EF = k \sum_{i=1}^N P_i \quad \text{Eq. 3-128}$$

sendo k o multiplicador relacionado ao tamanho da partícula; N é o número de perturbações por ano; P_i representa o potencial de erosão correspondente à maior velocidade do vento para o i -ésimo período entre perturbações, dado em g/m^2 .

O primeiro fator representado na Eq. 3-128 é o multiplicador relacionado ao tamanho da partícula (k), e varia com o seu tamanho aerodinâmico, representado na Tabela 3-1:

Tabela 3-1 – Multiplicador relacionado ao tamanho da partícula (k) para vários tamanhos aerodinâmicos

$> 30 \mu m$	$15 \mu m$	$10 \mu m$	$2.5 \mu m$
1,0	0,6	0,5	0,075

A frequência de perturbações em cada pilha é representada pela variável N . O modelo USEPA define uma perturbação como uma ação que resulta na exposição à superfície do material. Em uma pilha de estocagem, isso ocorre sempre que o material da pilha é adicionado ou removido da superfície da pilha.

O potencial de erosão (P) define a quantidade de massa de material particulado emitido por unidade de área da pilha (Eq. 3-129):

$$\begin{cases} P = 58(u^* - u_t^*)^2 + 25(u^* - u_t^*), & \text{se } u^* > u_t^*; \\ P = 0, & \text{se } u^* \leq u_t^*; \end{cases} \quad \text{Eq. 3-129}$$

sendo u^* a velocidade de fricção [ms^{-1}] e u_t^* a velocidade de fricção limite [ms^{-1}].

Assim, a formulação do potencial de erosão leva em conta o conceito de velocidade de fricção limite, que é a velocidade de fricção a qual a erosão devido ao vento inicia. A velocidade de fricção limite depende de dois fatores: características do material da superfície da pilha e velocidade do vento na superfície livre na área onde ocorre o experimento. O modelo USEPA de emissão lista, conforme Tabela 3-2, valores e velocidade de fricção limites feitas em túnel de vento portátil.

Tabela 3-2 – Velocidade de fricção limites para diversos materiais e condições. Fonte: USEPA (2006a, 2006b).

Material ³	Velocidade de fricção limite [ms^{-1}]
Solo coberto com material particulado	1,02
Escória de pavimentação	1,33
Sobra de carvão de entorno de pilhas	0,55
Pilha de carvão sem crosta	1,22
Resíduos de entorno de pilhas de carvão	0,62
Poeira de finos de carvão em superfície de concreto	0,54

Conforme já observado, o escoamento atmosférico é perturbado pela presença da pilha de estocagem. Essa perturbação é entendida como variações significantes da velocidade de fricção na superfície, em relação ao valor de referência, sem perturbação. O método utilizado pela USEPA considera cada zona de velocidade de fricção com mesma magnitude como uma fonte difusa separada. Assim, a velocidade de fricção é dada pela Eq. 3-130, quando não há perturbação, e pela Eq. 3-131, quando há perturbação:

$$u^* = 0,053u_{10}^+ \quad \text{Eq. 3-130}$$

$$u^* = 0,10 \left(\frac{u_s}{u_r} \right) u_{10}^+ \quad \text{Eq. 3-131}$$

sendo u^* – Velocidade de fricção levando em conta a Eq. 3-129; u_s – Velocidade medida ou simulada, por exemplo via Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) à altura de 25 cm da

³ Tradução livre

superfície da pilha; u_r – Velocidade do vento na superfície livre (longe da pilha); u_{10}^+ – Maior velocidade medido por anemômetro para um período entre duas perturbações.

O modelo USEPA propôs a distribuição de um fator de exposição, originários de experimentos em túnel de vento, para pilhas de estocagem isoladas. Essas subáreas representam diferentes níveis de exposição à erosão eólica. A Figura 3.14 ilustra as diferentes superfícies e configurações de pilhas subdivididas em regiões contendo o mesmo valor da relação u_s/u_r .

Finalmente, a emissão global de partícula para uma pilha é mostrada na Eq. 3-132:

$$E = \kappa \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M P_{ij} S_{ij} \quad \text{Eq. 3-132}$$

sendo κ – Multiplicador relacionado ao tamanho da partícula; M – Quantidade de superfícies com mesmo valor da relação u_s/u_r ; N – Número de perturbações por ano; P_{ij} – Potencial de erosão correspondente à maior velocidade do vento para o i -ésimo período entre perturbações para cada um das j -ésima áreas da pilha, em g/m^2 ; S_{ij} – Cada uma das subáreas da pilha, consideradas como diferentes fontes difusas.

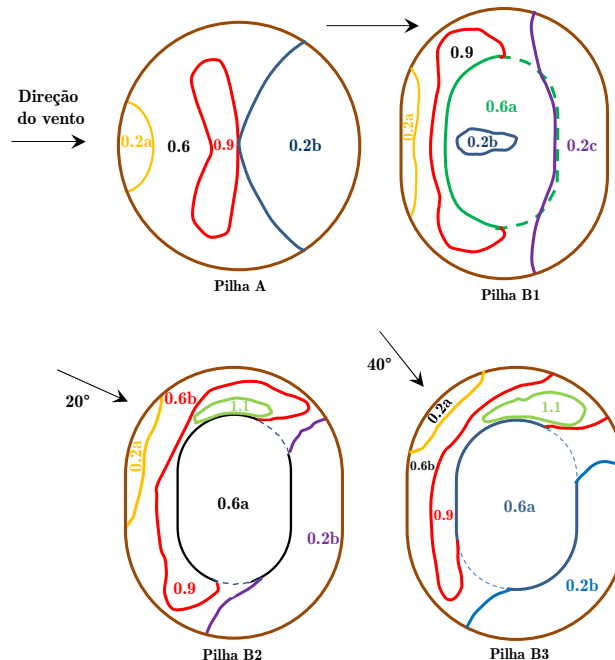


Figura 3.14 – Distribuição da velocidade normalizada u_s/u_r de pilhas de estocagem (A) – Formato de cone; (B1) – Formato oval com topo plano (ambas com direção do vento 90°); (B2) – Formato oval com topo plano e direção do vento 20°; (B3) – Formato oval com topo plano e direção do vento 40°. Fonte: Adaptado de USEPA (2006b).

Furieri (2012) desenvolveu experimentos em túnel de vento, analisando a erosão do vento na superfície de uma pilha de estocagem no formato *oblong* contendo partículas erodíveis e não

erodíveis. Os resultados apresentaram as seguintes conclusões: (i) redução da velocidade de fricção média na parte erodível das partículas de uma dada superfície na presença de partículas não erodíveis; (ii) diminuição temporal do fluxo de massa emitido e (iii) aumento da massa total emitida quando há a redução da quantidade de partículas não erodíveis da mistura.

A partir dos dados experimentais, o autor apresentou as modificações no modelo matemático USEPA (2006a, 2006b) relativo à Eq. 3-132, e concluiu:

“Testes em pilhas de carvão e outros materiais expostos usando túneis de vento portáteis têm mostrado que a taxa de emissão de partículas tende a cair rapidamente (meia-vida de poucos minutos) durante um evento de erosão. Em outras palavras, a superfície do material agregado tem se caracterizado por finita disponibilidade de material erodível (massa/área), quando se trata de potencial de erosão”.

O número de perturbações (N) da Eq. 3-132 é diretamente relacionado a essa observação. Contudo, o potencial de erosão (P) apresentado na Eq. 3-129 não leva em conta esse fenômeno. Além disso, a distribuição do tamanho das partículas é um parâmetro que não faz parte do modelo USEPA (2006a, 2006b).

Assim, foi desenvolvido um balanço de massa utilizada no experimento (massa emitida de areia que foi pesada antes e depois dos eventos de perturbação) e avaliados quatro diferentes configurações de percentual de massa de partículas erodíveis (%EP): 50%, 65%, 80% e 90%, isto é, houve uma massa de partículas erodíveis e não erodíveis (125 μm e 1000 μm) na proporção representada por esses percentuais.

Três valores de velocidade foram testados: 6, 7 e 8 m/s. Todas as configurações foram utilizadas para um mesmo formato de pilha, sendo a mesma isolada, além de direção do vento perpendicular. A distribuição de granulometria foi bimodal (representando as partículas erodíveis e não erodíveis). Os resultados das massas pesadas (g) com o parâmetro %EP e as três velocidades propostas, o balanço de massa (g) pôde ser representado pela Eq. 3-133:

$$M_{bal} = a_1(\%EP)^{a_2} \quad \text{Eq. 3-133}$$

sendo M_{bal} o balanço de massa; a_1, a_2 são os coeficientes definidos pelo método dos Mínimos Quadrados.

Esses experimentos geraram uma curva exponencial. Os pontos da curva representados na Tabela 3.3 relacionam o balanço de massa com o percentual de partículas erodíveis. Para o cálculo dos coeficientes (a_1 e a_2) pelo Método dos Mínimos Quadrados foram utilizadas as

correlações de dados da Eq. 3-133 e Eq. 3-134. Foi possível calcular o percentual de partículas erodíveis para a massa emitida pela metodologia USEPA (2006a, 2006b), conforme exemplo na Figura 3.15 (velocidade de 8 m/s), representada pela linha tracejada paralela ao eixo das abcissas (0,36 g). A exposição ao vento (u_s/u_r) foi simulada por métodos numéricos para as características da pilha em estudo (*oblong*, isolada e direção perpendicular à direção do vento). A velocidade de fricção foi determinada após experimentos em túnel de vento (0,25 m/s) (Harion *et al.*, 2010).

Dentro desse contexto, foi possível propor uma modificação do potencial de erosão (Eq. 3-129) de modo a levar em conta a influência do parâmetro %EP. A proposta apresentada substitui as duas constantes do modelo USEPA (58 e 25, da Eq. 3-129), por duas funções, conforme a Eq. 3-134:

$$P_{mod} = b_1(\%EP)^{b_2}(u^* - u_t^*)^2 + c_1(\%EP)^{c_2}(u^* - u_t^*) \quad \text{Eq. 3-134}$$

sendo P_{mod} o potencial de erosão modificado e b_1, b_2, c_1, c_2 são os coeficientes relacionados aos valores da massa emitida quantificada.

Tabela 3-3 – Balanço de massa para pilha modelo *oblong* com diversos percentuais de partículas erodíveis. Fonte: Furieri (2012).

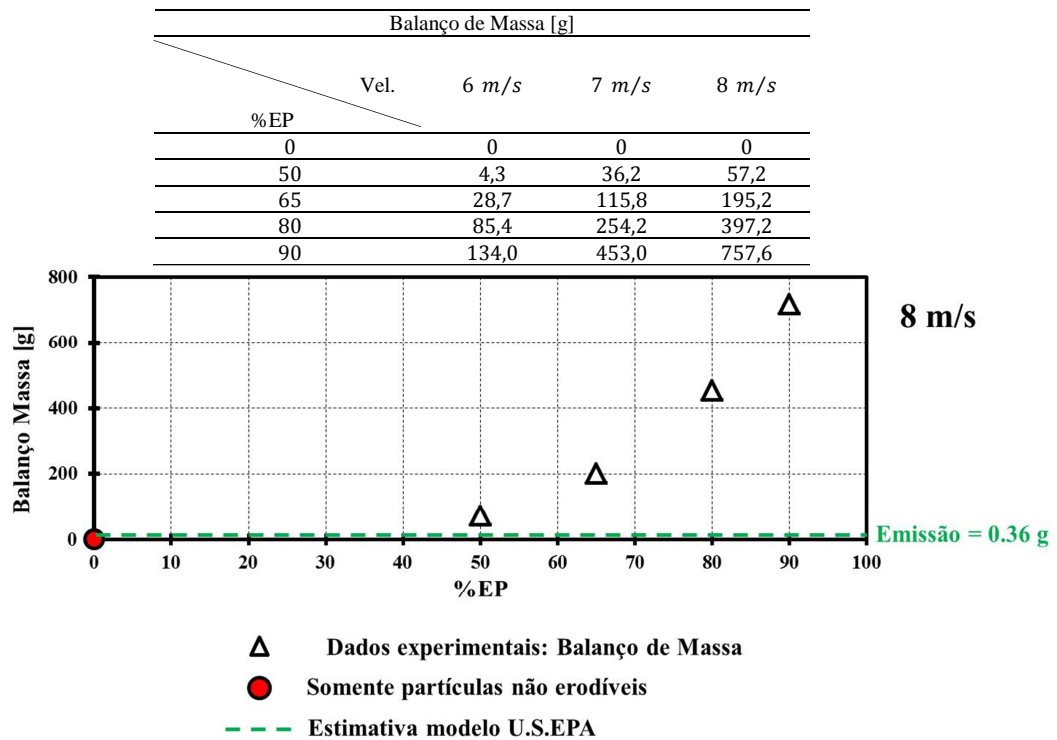


Figura 3.15 – Resultados obtidos em túneis de vento para velocidade de 8 m/s. Fonte: FURIERI (2012).

Os valores encontrados para as constantes foram: $b_1 = 0,0047$; $b_2 = 3,90$; $c_1 = -0,0007$; $c_2 = 3,90$ (valores válidos para as três velocidades testadas) após utilização dos métodos dos mínimos quadrados aplicados para as três velocidades. É possível observar que o resultado propõe o valor dessas constantes igual para todas as iso-superfícies.

3.1.4 Dispersão atmosférica de partículas - abordagem lagrangiana

A abordagem Euler-Lagrange do movimento é dividida em duas fases: uma primeira fase resolve as equações de transporte para a fase contínua (euleriana) e a simulação de uma segunda fase discreta, denominada partícula, na abordagem lagrangiana. Essa segunda fase consiste de partículas esféricas dispersas na fase contínua. Existem algumas opções na modelagem da fase partícula: (i) descrever a trajetória da fase partícula utilizando as equações lagrangianas que inclui a inércia da partícula, arrasto, gravidade considerando escoamento em regime permanente e transiente; (ii) incluir os efeitos da turbulência na dispersão das partículas devido aos vórtices turbulentos; (iii) acoplamento opcional do escoamento da fase contínua na predição dos cálculos da fase partícula. Quando o fluido age na partícula, há um correspondente efeito no fluido. Por exemplo, uma troca de momentum devido à força de arrasto. Numa análise das posições da partícula no domínio ao longo do tempo quando em regime transiente, observa-se que cada partícula avança um determinado número de passos de tempo, não necessariamente chegando a um destino final, antes que a solução seja atualizada. Os cálculos da fase partícula e da fase escoamento são feitos concorrentemente e ao mesmo tempo (apesar do passo de tempo das duas fases poderem ser distintas).

O objetivo das equações da fase partícula é rastrear um grande número de partículas esféricas pelo campo de escoamento, com a fase partícula opcionalmente trocando momentum com a fase fluido. O deslocamento da partícula é calculado utilizando o passo para frente da integração de Euler da velocidade da partícula sobre o passo de tempo, δt , conforme Eq. 3-135 e Eq. 3-136:

$$\frac{dx_p}{dt} = u_p \quad \text{Eq. 3-135}$$

$$x_p^n = x_p^0 + u_p^0 \delta t \quad \text{Eq. 3-136}$$

sendo x_p a posição da partícula.

A predição da trajetória da fase partícula é feita pela integração do balanço de forças na partícula sendo abordagem Lagrangiana. Esse balanço de forças iguala a inércia com as outras forças que agem na partícula, conforme Eq. 3-137:

$$\frac{du_p}{dt} = F_D(\vec{u} - \vec{u}_p) + \frac{\vec{g}(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + \vec{F} \quad \text{Eq. 3-137}$$

sendo \vec{F} representante das outras forças por unidade de massa que agem na partícula e $F_D(\vec{u} - \vec{u}_p)$ é a força de arraste por unidade de massa, que, por sua vez, é calculada conforme (Eq. 3-138):

$$F_D = \frac{18\mu}{\rho_p D_p^2} \frac{C_D Re}{24} \quad \text{Eq. 3-138}$$

sendo \vec{u} a velocidade do fluido [ms^{-1}]; \vec{u}_p é a velocidade da partícula [ms^{-1}]; μ – Viscosidade cinemática do fluido [$\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$]; ρ é a densidade do fluido [kgm^{-3}]; ρ_p é a densidade da partícula [kgm^{-3}]; D_p é o diâmetro da partícula [m]; C_D representa o coeficiente de arraste. Para partículas esféricas é calculado segundo a Eq. 3-139 (MORSI & ALEXANDER, 1972):

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re_p} + \frac{a_3}{Re_p^2} \quad \text{Eq. 3-139}$$

sendo a_1 , a_2 e a_3 constantes que assumem valores diferentes para cada faixa do Número de Reynolds da partícula que, por sua vez, para uma partícula esférica, é calculado de acordo com a Eq. 3-140:

$$Re_p = \frac{\rho D_p |\vec{u} - \vec{u}_p|}{\mu} \quad \text{Eq. 3-140}$$

sendo \vec{u} a velocidade do fluido [ms^{-1}] e \vec{u}_p a velocidade da partícula [ms^{-1}].

A Eq. 3-137 incorpora forças adicionais por unidade de massa (\vec{F}), no balanço de força da partícula, que podem ser importante em especiais circunstâncias. A Tabela 3-4 lista essas forças, o seu significado, e as simplificações possíveis (Eq. 3-141 a Eq. 3-146).

Tabela 3-4 – Outras forças que podem ser incorporadas à Eq. 3-137 (ANSYS FLUENT, 2013)

<i>Força (por unidade de massa)</i>	<i>Definição</i>	<i>Justificativa</i>	
Força devido à Massa Virtual: $F = \frac{1}{2} \frac{\rho}{\rho_p} \frac{d(\vec{u} - \vec{u}_p)}{dt}$	Força necessária para acelerar o fluido no entorno da partícula	$\frac{\rho}{\rho_p} \ll 1$	Eq. 3-141
Força devido ao gradiente de pressão: $F = \left(\frac{\rho}{\rho_p} \right) \vec{u}_p \nabla u$	Acelerar o fluido devido ao gradiente de pressão, importante somente quando a densidade do fluido é comparável ou maior que a densidade da partícula.	$\frac{\rho}{\rho_p} \ll 1$	Eq. 3-142
Forças devido ao movimento angular em torno das coordenadas de referência: $F = (-2 \Omega \times \vec{u}_p - \Omega \times \Omega \times \vec{r}_p)$	Forças devido à rotação em torno de um dos eixos das coordenadas	Não há rotação em torno dos eixos.	Eq. 3-143
Força termoforética: $F = -D_{T,p} \left(\frac{1}{m_p T} \right) \nabla T$	Forças que agem na partícula que estão imersas em gases que contém gradiente de temperatura, agindo na direção contrária desse gradiente (Termoforese).	Não há gradiente de temperatura.	Eq. 3-144
Força Browniana: $S_{n,ij} = \frac{216 \nu k_B T \delta_{ij}}{\pi^2 \rho d_p^5 \left(\frac{\rho_p}{\rho} \right)^2 C_c}$	Forças devido ao movimento Browniano.	Somente para partículas sub-micron.	Eq. 3-145
Forças de cisalhamento de Saffman $F = \frac{2K \nu^{1/2} \rho S_{ij}}{\rho_p d_p (S_{ik} S_{ki})^{1/4}} (\vec{u} - \vec{u}_p)$	Forças devido ao cisalhamento	Somente para partículas sub-micron e pequenos Re_p (Eq. 3-140)	Eq. 3-146

sendo ∇u o gradiente de velocidade [s^{-1}]; Ω é a velocidade Angular [s^{-1}]; \vec{r}_p é a coordenada da partícula [m]; $D_{T,p}$ representa o coeficiente de Termoforese (Talbot *et al.*, 1980); ∇T – Gradiente de temperatura [Km^{-1}]; k_B – Constante de Boltzmann [JK^{-1}]; δ_{ij} – Delta de Kronecker[-]; S_{ij}, S_{ki}, S_{ik} – Tensor taxa de deformação [s^{-1}]; C_c – Fator de correção de Cunningham (já explicado na Eq. 3-4); $K = 2.594$.

3.1.5 Distribuição de tamanho das partículas

O conhecimento do tamanho e da distribuição do tamanho das partículas é um pré-requisito fundamental para a análise da transportabilidade das mesmas durante o processo de erosão eólica, influenciando sua suspensão e deposição. A sua forma, densidade e tamanho são algumas

das características relacionadas com propriedades secundárias como resistência ao escoamento, segregação, entre outras.

Um modelo que apresenta uma conveniente representação da distribuição de tamanhos é a distribuição de Rosin-Rammler (BAILEY *et al.*, 1983; ALDERLIESTEN, 2013). A hipótese desse modelo é que existe um relacionamento exponencial entre o diâmetro da partícula e a fração mássica da partícula de diâmetro maior ou igual a d . Assim, a faixa completa de tamanhos de partículas é dividida em intervalos discretos, cada um representando o diâmetro médio para os quais os cálculos das trajetórias são utilizados. A representação da fração mássica do diâmetro maior ou igual a d é mostrada na Eq. 3-147:

$$Y(d) = 1 - e^{-(d/\delta)^n} \quad \text{Eq. 3-147}$$

sendo δ e n constantes empíricas. Observa-se que $Y(0) = 0$ e $Y(\infty) = 1$.

Aplicando-se o log duas vezes na Eq. 3-147:

$$\ln[-\ln(1 - Y(d))] = n \ln(d) - n \ln(\delta) \quad \text{Eq. 3-148}$$

As constantes δ e n podem ser determinadas plotando a distribuição cumulativa em coordenadas log-log, conforme Figura 3.16:

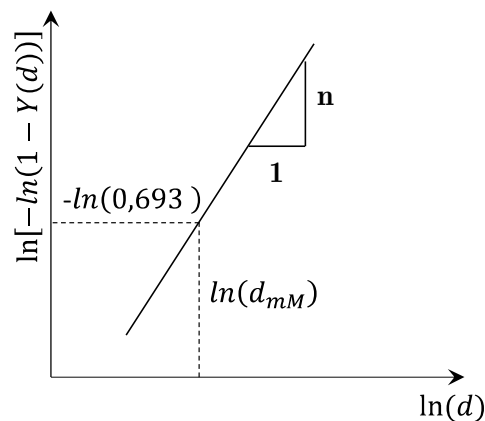


Figura 3.16 – Distribuição de Rosin-Rammler

Um importante parâmetro no cálculo da distribuição de partículas segundo a metodologia Rosin-Rammler é o valor d_{mM} , que pode ser definido como o diâmetro no qual todas as partículas em uma amostra são arranjadas em ordem ascendente de massa, dividindo a massa da amostra dentro do percentual específico. O percentual de massa abaixo de um diâmetro de interesse é o número expresso como d_{mM} . Por exemplo, d_{10M} é o diâmetro no qual 10% da massa da amostra é composta das menores partículas, e d_{50M} é o diâmetro no qual 50% da

massa da amostra é composta das menores partículas, e d_{50M} também é conhecido como diâmetro médio de massa (d_{50M}), e divide a amostra igualmente pela massa.

Uma vez informado o valor do diâmetro médio de massa (d_{mM}), é possível calcular o valor de δ , através da expressão representada na Eq. 3-148:

$$\delta = \frac{d_{mM}}{0,693^{1/n}} \quad \text{Eq. 3-149}$$

Uma vez que se têm os valores de δ , n e o diâmetro médio de massa, é possível ter a distribuição da amostra por essa metodologia informando-se finalmente, com relação à amostra, o menor diâmetro, o maior diâmetro e a massa.

3.2 Trabalhos correlatos

Nesta seção são apresentados alguns trabalhos sobre modelagem de turbulência e estudos em túnel de vento para a dispersão de poluentes e escoamento na atmosfera ao redor de um obstáculo isolado, tanto cúbico quanto pilha de estocagem, tendo como objetivo a contextualização do presente estudo.

3.2.1 Escoamento ao redor de obstáculos

Um dos primeiros trabalhos na área do estudo de escoamentos ao redor de obstáculos foi realizado por Parkinson e Jandali (1970). Eles consideraram o escoamento como potencial bidimensional ao redor de um corpo, considerando apenas o fluxo não viscoso e irrotacional. Os resultados apresentados mostraram boa concordância com os dados de pressão medidos ao longo das superfícies não afetadas pela recirculação do fluido. Entretanto, não foram geradas informações sobre as regiões de esteira e de separação.

Puttock e Hunt (1979) apresentaram um dos primeiros estudos para modelar a dispersão ao redor de prédios utilizando as equações de transporte. Os autores conseguiram descrever melhor o escoamento na região de recirculação e uma equação analítica foi obtida para calcular as concentrações do contaminante com base no coeficiente turbulento de difusão, através da integração da equação de conservação da espécie química. A principal hipótese assumida foi considerar a concentração constante dentro da esteira turbulenta e, detalhes da estrutura da turbulência nas regiões de vizinhança do obstáculo e na região de esteira poderiam ser deixados para segundo plano.

Murakami & Mochida (1987) simularam um escoamento turbulento tridimensional e transiente ao redor de um obstáculo cúbico utilizando LES com modelo Smagorinsky de submalha. Foram apresentados a distribuição da velocidade média, diversas estatísticas turbulentas (intensidade, espectro de velocidade, escala integral) e os resultados obtidos foram comparados com dados obtidos de experimentos em túnel de vento com o objetivo de examinar a acurácia do LES do ponto de vista das aplicações de engenharia. Vários tipos de simulação numérica foram efetuados com diferentes tipos de condições de contorno na parede e diferentes valores impostos da constante de Smagorinsky. Entre outros resultados, o trabalho mostrou o grande potencial de prever escoamento ao redor de obstáculos. No entanto, os escoamentos na face do obstáculo a barlavento quando os fluxos tinham a direção para baixo não foram bem reproduzidos, foi observada a significativa dependência da flutuação da velocidade com a constante de Smagorinsky, mas não influencia a distribuição do vetor velocidade média para os valores testados.

Murakami & Iizuka (1999) fizeram uma análise de escoamento turbulento utilizando CFD para uma barra quadrada horizontal transversal ao escoamento. O estudo apresentou os modelos de submalha Smagorinsky e Smagorinsky Dinâmico e comparou-os com experimentos em túnel de vento. Os resultados demonstraram ser o modelo Smagorinsky Dinâmico o mais promissor para a época, uma vez que apresentou resultados mais acurados, apesar dos cálculos computacionais tenderem a ser mais instáveis nesse modelo de submalha quando aplicados a este tipo de problema. Alguns problemas a ser resolvidos para aplicações práticas do LES foram alertados: - Um dos mais importantes estava relacionado ao tratamento das flutuações de velocidade na entrada. O trabalho utilizou um método artificial para gerar a turbulência na entrada, apresentado resultados satisfatórios.

Badr e Harion (2007) estudaram a influência de diferentes configurações de pilhas de particulados de acordo com o volume de material, ângulo fixo de repouso e diversas velocidades do vento sobre a taxa de emissão de MP. Para isso foi avaliada a influência do obstáculo na distribuição da tensão de cisalhamento nas iso-superfícies da pilha. O modelo utiliza CFD e resolve as equações médias de Reynolds com o Método dos Volumes Finitos. Uma malha não estruturada foi utilizada para acompanhar os contornos da superfície e geometria da pilha. O esquema de discretização utilizado para a solução numérica foi de segunda ordem e acoplamento velocidade-pressão SIMPLEC. O fechamento da turbulência foi feito através do modelo de duas equações κ - ω -SST. Foi definido perfil neutro de estratificação atmosférica, além de condições de contorno simétricas nas laterais e no limite

superior do domínio. As condições de saída foram de escoamento bem-desenvolvido, com gradiente zero normal para todas as variáveis, com exceção da pressão. A superfície foi considerada rugosa. Os resultados sugerem que mudanças na configuração da pilha podem reduzir as emissões fugitivas, uma vez que houve mudanças nas áreas em que ocorrem as mesmas faixas de tensões de cisalhamento nas iso-superfícies.

Toraño *et al.* (2007) desenvolveram sob certas condições de direção do vento e configurações da pilha a comparação entre o modelo USEPA (1999, 2006a, 2006b) e a simulação numérica das equações de transporte utilizando CFD. A Figura 3.17 mostra as configurações das pilhas estudadas nesse trabalho. Foram testados os seguintes modelos de turbulência: $\kappa\text{-}\varepsilon$ (com e sem rugosidade superficial) e $\kappa\text{-}\omega$ baseado no modelo SST (*Shear Stress Transport*). Foram ainda investigados diferentes perfis (logaritmo e semi-logaritmo) de velocidade do vento. O modelo $\kappa\text{-}\varepsilon$ utilizando rugosidade e perfil de velocidade logarítmica foi o que apresentou o menor Erro Quadrático Médio, quando comparado com o modelo USEPA (1999, 2006a, 2006b). Os erros encontrados nos testes foram em torno de 3 a 4%.

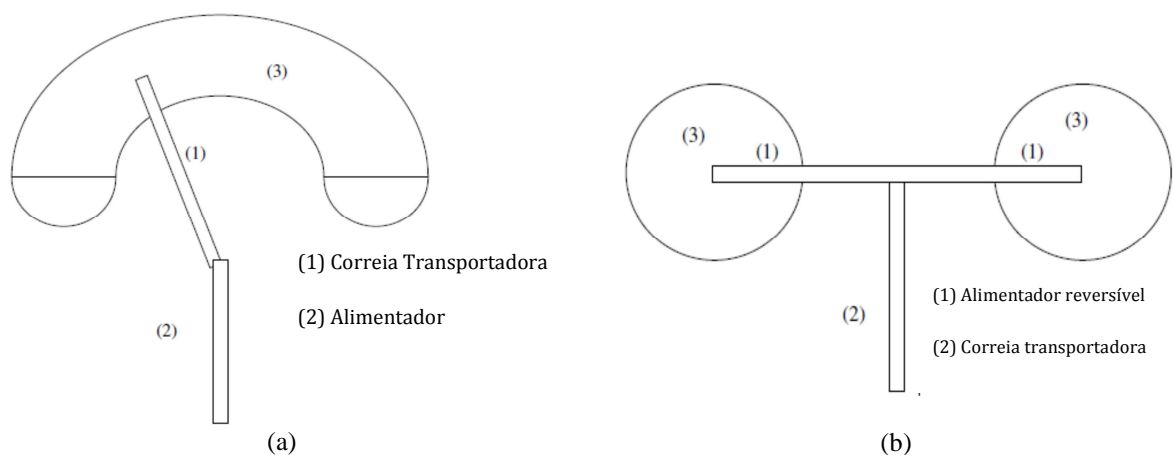


Figura 3.17 – Configurações das pilhas estudadas: a) Oval; b) Cônica.

Lim, Thomas e Castro (2009) apresentaram uma simulação numérica de um escoamento ao redor de uma superfície cúbica montada em uma camada limite turbulenta. O método utilizado para gerar as condições de contorno na entrada para a geração de turbulência foi a simulação do precursor separado de um ambiente de escoamento e utilizada como entrada diretamente dessa simulação. Ou seja, a turbulência na entrada para a simulação do obstáculo foi gerada utilizando o precursor LES no qual as flutuações do campo de velocidades (u, v, w) na saída foi amostrada a cada passo de tempo e salvo em um banco de dados. Os resultados incluíram uma comparação detalhada entre as medidas no túnel de vento e a simulação numérica das condições de contorno de entrada e o campo de escoamento em torno do cubo, incluindo o escoamento médio e as flutuações de pressão na superfície. No entanto, devido

aos modelos de lei da parede e ao método de diferenças finitas com malhas grossas, houve subestimação em 20-30% nos níveis verticais de turbulência e superestimação da velocidade média em relação aos experimentos. O trabalho sugere uma investigação mais adequada no modelo de submalha utilizado nas regiões de escoamento permanente e também onde há fortes vorticidades quando o obstáculo está a 45°. Outros pontos a ser avaliados são os de regiões onde o cisalhamento é alto, uma vez que nessas áreas as médias e flutuações de pressões superficiais não foram bem capturadas.

Tominaga & Stathopoulos (2010) compararam o modelo RANS e LES com o objetivo de desenvolver um modelo de dispersão ao redor de um obstáculo isolado. O trabalho mostrou que a modelagem LES dá melhores resultados da distribuição de concentração, embora a diferença na velocidade média não seja tão grande. O método numérico utilizado foi Volumes Finitos para solução do escoamento e equações de concentração em malha estruturada retangular. Para o modelo RNG $k-\epsilon$ o número de Schmidt utilizado foi 0.7 e esquema QUICK para discretização das equações de momentum e concentração. No modelo LES foi utilizado o modelo de submalha Smagorinsky com o valor de $C_s=0.12$. O modelo de submalha Smagorinsky dinâmico foi utilizado, no entanto houve uma discrepância no comportamento do escoamento próximo à parede, além de tender a causar instabilidade numérica e aumentar o tempo computacional. Foi utilizada a função de amortecimento de Van Driest. O número de Schmidt utilizado foi 0.5. O esquema de segunda ordem de diferenças centradas foi adotado para as derivadas espaciais. Para o avanço no tempo foi utilizado o esquema Adams-Bashforth para os termos convectivos e Crank-Nicolson para os termos difusivos. Os resultados de recolamento dos dois modelos mostraram boas concordâncias com os valores experimentais para o recolamento após o obstáculo, no entanto o modelo RNG superestimou enormemente os resultados experimentais com relação ao recolamento na parte superior (teto) do obstáculo.

Tominaga & Stathopoulos (2012) modelaram o fluxo turbulento de um escalar utilizando CFD para investigar a dispersão em torno de um conjunto de obstáculos cúbicos (5 x 6). Foram analisados os campos de velocidade e concentração, ambos obtidos por dois modelos de turbulência: RANS RNG $k-\epsilon$ e LES. Uma fonte pontual foi utilizada na região central dos obstáculos. Os resultados mostraram melhor acurácia do modelo LES em comparação com RANS e com os experimentos conduzidos pelos autores. LES dá melhores resultados que RNG $k-\epsilon$ em termos do perfil médio de velocidade e distribuição de concentração em comparação com os resultados em experimentos em túnel de vento. A viscosidade e difusão

turbulenta foram obtidas por meio do modelo Smagorinsky dinâmico de submalha. Grandes diferenças foram observadas entre as turbulências dos dois modelos.

3.2.2 Modelos Euler-lagrange

Diversos trabalhos foram desenvolvidos simulando numericamente a suspensão de partículas utilizando a abordagem lagrangiana. Nessa linha, Minier & Peirano (2001) desenvolveram um modelo estatístico para abordagem lagrangiana de partículas polidispersas em regime turbulento. O trabalho desenvolveu uma ampla revisão matemática de processos estocásticos e a física da turbulência.

Com o objetivo de avaliar a trajetória de partículas em escoamento turbulento ao redor de um obstáculo em forma de degrau invertido, Wang, Zhang e Wang (2006) simularam numericamente o escoamento de fluido utilizando LES e abordagem lagrangiana para a fase partícula. O número de Stokes variou entre 0,01 a 111,18 e o número de Reynolds foi de 18400, baseado na altura do degrau e na velocidade média do fluido na entrada. O modelo de submalha utilizado no LES foi o Smagorinsky. Os resultados evidenciaram a forte dependência das partículas com a turbulência do fluido, principalmente as partículas menores ($2 \mu m$). Já as partículas maiores ($200 \mu m$) mantêm a inércia ao longo de sua trajetória sem responder às flutuações do fluido, enquanto as partículas de tamanho intermediário não seguem exatamente o escoamento e existe um intervalo de tempo maior, em relação às partículas menores, para a partícula atingir a velocidade do fluido. O estudo também reporta uma tendência de elevada concentração de partícula na região da esteira turbulenta, no entanto são necessários mais estudos com partículas de outros tamanhos e melhor verificação das tendências dessas partículas com relação ao transporte na atmosfera e deposição na superfície. Algumas contribuições foram observadas: *i*) LES pode prover importantes informações nas flutuações instantâneas de concentração, o que não é possível através de RANS; *ii*) LES dá melhores resultados na modelagem de distribuição de concentração. A difusão de massa é bem representada pelo LES, devido principalmente a reprodução das flutuações de concentração em torno do obstáculo; *iii*) RANS subestimou a difusão turbulenta próxima ao obstáculo em comparação com LES; *iv*) Dificuldades devido aos diferentes critérios de convergência, uma vez que o tempo de CPU requerido para obter resultados estatísticos no LES foi 25 vezes maior que RANS.

Jin *et al.* (2007) desenvolveram um modelo geométrico tridimensional para simular o trato respiratório humano (TRH). O modelo continha boca, faringe, laringe e traqueia. A

modelagem da turbulência utilizada foi LES, de modo a investigar a deposição de partículas inaláveis no TRH. Os resultados demonstraram que quando há um aumento do diâmetro da partícula, da densidade da partícula e da intensidade da respiração (transiente), a eficiência de deposição das partículas no TRH é maior. Os resultados corresponderam satisfatoriamente aos dados experimentais.

Berrouk & Laurence (2008) utilizaram o modelo estocástico de Langevin para acompanhar partículas em um tubo circular com ângulo de 90°. A modelagem da turbulência utilizada foi LES Smagorinsky. Os resultados foram comparados com trabalhos experimentais e modelo DNS para a faixa de número de Stokes (St) estudada (entre 0,001 e 1,5). Foi observado que houve uma maior influência do modelo de submalha na eficiência de deposição das partículas com $St < 0,3$.

Roney & White (2010) efetuaram a modelagem numérica 2D da movimentação de partículas provenientes de superfície plana não pavimentada e compararam os resultados obtidos com experimentos em túnel de vento. Foram efetuadas as comparações dos seguintes parâmetros: perfis verticais e horizontais de concentração de partículas. A simulação numérica envolveu o método de diferenças finitas com acurácia de segunda ordem e formulação Power-Law com esquema de interpolação Crank-Nicolson. As comparações com o modelo indicaram boas concordâncias, mostrando que os mecanismos físicos de advecção e difusão são modelados razoavelmente com a escolha das equações para uma amostra de um processo em regime permanente próxima à superfície. Os códigos dos resultados foram diretamente comparados às medidas físicas da concentração de poeira em túnel de vento pelo uso da real concentração no contorno da superfície e perfis de velocidade dos experimentos. No geral, as soluções de regime permanente das equações de advecção-difusão para emissão de PM_{10} resultaram em perfis de concentração de razoável correlação entre a solução numérica e o experimento. A solução foi simples, no entanto não houve nenhuma tentativa na solução tridimensional transiente com os resultados experimentais, em que modelos mais completos podem ser utilizados para melhor avaliar as emissões fugitivas de superfícies erodíveis. Também não houve nenhuma menção a ressuspensões do solo.

Adams *et al.* (2011) simulou numericamente a dispersão de partículas esféricas com larga faixa de tamanhos e alto número de Reynolds em duto de seção quadrada. Foram realizadas comparações entre os modelos de turbulência LES e $k-\varepsilon$. Os resultados mostraram boas concordâncias entre as duas técnicas. A velocidade utilizada na abordagem lagrangiana foi a velocidade média gerada no modelo $k-\varepsilon$ e a resolvida no modelo LES. As flutuações de

velocidade na entrada do modelo LES foram geradas por meio de séries de Fourier (turbulência sintética). Os resultados mostraram máxima ressuspensão na área da primeira metade do duto, com uma área de ressuspensão preferencial das menores partículas. A principal diferença apresentada entre os modelos estudados foi a magnitude da taxa de ressuspensão, sendo que o modelo RANS teve uma maior variabilidade ao longo do duto, indicação de inacurácia inerente aos modelos RANS associada ao método de acoplamento com a abordagem lagrangiana.

3.2.3 Condição de entrada para LES

Ao aplicar o modelo de turbulência LES, as condições de entrada tem um significativo impacto na dinâmica do escoamento. Na entrada do domínio as flutuações turbulentas estão presentes, e alguns métodos tem que ser encontrados para gerar flutuações de velocidade de modo a se comportar como um escoamento turbulento.

Kondo, Murakami & Mochida (1997) geraram as flutuações de velocidade para as condições de contorno na entrada de LES artificialmente, baseadas na simulação de Monte Carlo modificada para satisfazer a equação da Continuidade. Os resultados foram satisfatórios, uma vez que a divergência com os experimentos foi reduzida e o decaimento da energia cinética turbulenta na direção do escoamento foi bem reproduzido pelo LES.

Tabor & Baba-Ahmadi (2010) fizeram uma ampla revisão das condições de entrada para LES, salientando a simplicidade que a dificuldade dessas condições está em garantir que ela satisfaça as equações de Navier-Stokes. A revisão demonstra diversos métodos de condições de entrada de LES e DNS: 1) Métodos artificiais de geração de turbulência, como as técnicas de Fourier e outras relacionadas, como Métodos de Decomposição Principal Ortogonal (POD) e que envolvem geração de números randômicos através de filtros digitais; 2) Métodos de simulação prescritos, entre eles bibliotecas preparadas através de localizações prescritas no domínio computacional e os resultados salvos em banco de dados. Os resultados indicaram que os métodos da primeira categoria tentam construir um campo de componente aleatório na entrada adequado para as propriedades turbulentas e são mais fáceis de especificar os parâmetros dessa turbulência, tais como as escalas de comprimento ou níveis de energia turbulenta. Também são rápidas de construir e alterar se as condições do problema são mudadas.

Huang, Li & Wu (2010) apresentaram um gerador de turbulência de propósito geral para condições de entrada para LES denominado *Discretizing and Synthesizing Random Flow*

Generation (DSRFG), sendo que as simulações foram efetuadas em um obstáculo cúbico para e comparados com experimentos em túnel de vento. Os resultados apresentados indicaram que o método DSRFG pode descrever de forma satisfatória a turbulência para as condições na entrada, descrever espacialmente o espectro anisotrópico e há a liberdade de gerar o campo de escoamento e ajustá-lo de acordo com a necessidade através da escolha de um fator de escala espacial apropriado. É importante salientar que embora a melhoria da geração de turbulência na entrada possa aumentar a acurácia dos resultados em LES, outros aspectos como a limitação do modelo de submalha e as funções de tratamento na parede ainda podem trazer erros computacionais.

3.2.4 Condições de parede

Diversos trabalhos envolvendo LES trataram a condição de parede de diversas formas, e uma das pioneiras é de Schumann (1975). O autor propôs ignorar a camada próxima à parede e modelar seus efeitos, através da consideração de que a malha próxima à parede é muito grossa para resolver as turbulências que contribuem com o transporte de momentum.

Cabot & Moin (2000) fizeram uma revisão com o objetivo de investigar simulações em que ocorrem tanto o caso de escoamentos separados quanto próximos de regiões de parede em malhas grossas em que a região próxima à parede não é resolvida. Ao invés disso, é representada por condições de parede. O modelo de submalha utilizado foi Smagorinsky dinâmico. Os resultados foram satisfatórios em escoamentos longe da parede (desde o método numérico seja adequado), mas ruins próximos à parede. As deficiências foram devido a inacurácia na modelagem de submalha e erros numéricos.

Piomelli & Balaras (2002) e Piomelli (2008) fizeram uma ampla revisão das classes de soluções para a lei da parede em LES, dividindo-as em três classes: *i*) ignorando a região completamente através de funções que tratam da parede, denominadas leis de equilíbrio baseadas no perfil logarítmico da velocidade; *ii*) através de modelos zonais, que resolvem uma série de equações da camada limite turbulenta na região próxima à parede, com um fraco acoplamento em relação ao escoamento fora dessa região; e *iii*) métodos híbridos no qual o modelo passa de modelo RANS quando está próximo a parede para LES na parte externa à parede.

3.2.5 Estudos em túnel de vento

Weiping *et al.* (2001) desenvolveram estudos em túnel de vento com o objetivo de avaliar o transporte de partículas em escoamento turbulento e sua deposição. O transporte de partículas e sua deposição foram analisados por meio da medição das características turbulentas do escoamento de ar e a deposição de partículas de urânio monodispersas de 2.0-4.5 μm de diâmetro em superfícies horizontais lisas. Os resultados dos experimentos mostraram a complexa natureza da deposição em escoamentos turbulentos devido a interações entre as partículas e a turbulência. Em geral, o fluxo de deposição de partículas foi maior próximo à esteira turbulenta, e menor longe da esteira. O fluxo de deposição de partículas mostrou ser independente do tempo de relaxação adimensional quando esse tempo foi menor que 1 (um), mas aumentou rapidamente quando o tempo de relaxação aumentou acima de 1 (um). As metodologias de medição das concentrações das partículas do ar fizeram com que as análises focassem no fluxo de deposição dessas partículas no ar, ao invés de velocidade de deposição e não foi feita análise das partículas que ricocheteavam nas paredes do túnel de vento.

Cierco, Naaim & Naaim-Bouvet (2008) desenvolveram um estudo experimental de flutuações de concentração de material particulado em escoamento turbulento em regime permanente. Foram observadas características específicas da física do fenômeno de voo de partículas de areia e de PVC, através do processamento de imagens de filmes de alta velocidade (500 Hz). O papel da turbulência na geração desse fenômeno é discutido utilizando um modelo teórico simples capaz de descrever o comportamento aerodinâmico da partícula. Para cada experimento, o túnel de vento foi utilizado duas vezes na mesma velocidade do vento, primeiro sem partículas, e depois com as partículas. O objetivo desse procedimento foi verificar a influência do MP na velocidade do fluido. Para medir a velocidade média e a quadrática média (*rms*) do vento foram utilizados Anemômetro Doppler. Foi verificado com esse experimento que não houve alteração significativa do escoamento, uma vez que a concentração de partículas não excedeu 10^{-4} . A capacidade limitada dos instrumentos disponíveis limitou o intervalo de velocidades do experimento. Também não foi possível avaliar as consequências de um modelo de turbulência transiente.

Furieri (2012) desenvolveu experimentos em túnel de vento, analisando a erosão do vento na superfície de uma pilha de estocagem no formato *oblong* contendo partículas erodíveis e não erodíveis. Os resultados apresentaram as seguintes conclusões: (i) redução da velocidade de fricção média na parte erodível das partículas de uma dada superfície na presença de partículas não erodíveis; (ii) diminuição temporal do fluxo de massa emitido e (iii) aumento

da massa total emitida quando há a redução da quantidade de partículas não erodíveis da mistura.

Furieri *et al.* (2013) estudaram a influência de partículas não erodíveis no fenômeno de erosão em uma pilha *oblong* com areia (granulometria bimodal) em experimentos em túnel de vento. Também foi analisada a influência da estrutura de escoamento em torno da pilha. As configurações testadas consistiram de dois diferentes valores de cobertura de partículas não erodíveis (10% e 20%) e três velocidades de superfície livre (6,7 e 8 m/s). Os resultados mostraram que as maiores quantidades de partículas emitidas foram para as maiores velocidades do vento e menor taxa de cobertura de partículas não erodíveis. O fluxo de massa de partículas foi fortemente diminuído nos primeiros quatro minutos mensurados. A análise qualitativa (sistema de fotografia de alta qualidade) da superfície da pilha mostrou que a gradual mudança induzida pelas partículas não erodíveis induz ao efeito de pavimentação em algumas áreas da pilha, o que indica típicas zonas de erosão eólica: alta fricção na superfície na linha da crista e laterais da pilha; baixa fricção na superfície oposta à direção do vento (parte protegida da pilha) e na zona de recirculação a montante.

3.3 Conclusões da revisão bibliográfica

A revisão de literatura apresentou diversos trabalhos com simulações numéricas com modelos de turbulência RANS e LES, além de experimentos, para analisar escoamento em obstáculos e emissão de materiais granulares em pilhas de estocagem, as quais, devido à erosão eólica, agem como fontes difusas de poluentes. Os principais objetivos desses trabalhos foram relacionados ao desenvolvimento de apoio teórico de modo a melhorar a acurácia das estimativas das emissões e dispersões de MP emitidos de uma pilha de estocagem e as implicações do uso de modelos de turbulência RANS e LES.

A primeira parte da revisão descreveu os conceitos fundamentais gerais em diversos aspectos: tópicos introdutórios de erosão eólica, abordagem euleriana e descrição das equações governantes e as zonas turbulentas ao redor de obstáculos cúbicos e pilhas, modelos de emissão USEPA e equações governantes da descrição lagrangiana do movimento de partículas de diversos tamanhos. A segunda parte listou trabalhos científicos encontrados na literatura sobre o tema. Dentro desse contexto, foram observados que os mecanismos de entranhamento indicaram como as partículas são transportadas após o evento de erosão eólica: saltos, suspensão ou rolamento. Vários estudos discutiram a erodibilidade das partículas pelo escoamento turbulento, enquanto outros focaram nos efeitos da presença do obstáculo no

escoamento turbulento. Ao se comparar os escoamento em torno de obstáculos cúbicos e pilhas no formato *oblong*, foram percebidos diferentes padrões de escoamentos, apesar da observação de semelhanças nas nomenclaturas (esteira turbulenta, zona de recolamento, zona de estagnação, vórtice da ferradura, etc...). Esses padrões de escoamentos diferentes podem sugerir também diferenças na movimentação de partículas quando sujeitas a estes dois tipos de escoamento.

A metodologia de quantificação de emissão de partículas de fontes difusas, proposta pela USEPA é largamente utilizada. O que não é encontrado na literatura é a possibilidade de utilizar o modelo USEPA como entrada para analisar a suspensão, deposição e ressuspensão de partículas encontradas na superfície e na região no entorno de pilhas. A revisão também indicou o modelo de turbulência LES pode ser uma alternativa para a simulação numérica do escoamento ao redor de pilhas de estocagem.

Por fim, apesar da constatação na literatura de que a abordagem Euler-lagrangiana nos estudos de emissão e dispersão já esteja consolidada, deixa a desejar no que tange a uma proposta de junção de modelos que tentem buscar o sucesso do modelo Euler-Langrange e a experiência do modelo USEPA de emissões. Além disso, deseja-se uma melhor acurácia da investigação e análise do comportamento das partículas nos fenômenos de suspensão, deposição e ressuspensão. Para isso, também a modelagem da turbulência é de suma importância para resolver as grandes escalas onde estão a maior parte da energia e que dê um tratamento ao processo erosivo no que se refere aos locais de onde as partículas erodem e a fricção a que estão sujeitas. Esses modelos para essa classe de problemas também precisam ser observados no que se refere às hipóteses simplificadoras, de modo que não haja comprometimento dos resultados esperados e das validações necessárias.

4 METODOLOGIA

Este capítulo apresenta a metodologia utilizada no presente trabalho, para formulação da modelagem matemática e validação das simulações numéricas. São apresentados o domínio do problema, a solução e hipóteses simplificadoras das equações de conservação da massa e momentum da fase fluido que representam o escoamento do vento na abordagem Euleriana e o balanço de forças que trata da fase partícula na abordagem lagrangiana; o modelo LES utilizado para incluir os efeitos da turbulência; a geração da turbulência na entrada do domínio; as condições de contorno e iniciais; a injeção de partículas nas subáreas da pilha; a descrição dos experimentos em túnel de vento utilizados para validar as simulações numéricas e, finalmente, o desenvolvimento do pós-processamento para quantificar as partículas no domínio de estudo.

Foram investigados dois cenários distintos: (i) o primeiro cenário consiste na simulação numérica do trabalho experimental realizado em túnel de vento por Zhang, Wang e Lee (2007), a fim de verificar a precisão/acurácia do modelo matemático proposto para a representação do escoamento atmosférico e da emissão e dispersão de partículas de diversas faixas granulométricas emitidas para a atmosfera devido à erosão eólica; (ii) o segundo cenário representa a simulação de uma pilha, anteriormente desenvolvido em túnel de vento por Turpin (2010) e Furieri (2013), com o objetivo inicial de verificar a melhora nos resultados relativos ao escoamento ao redor de pilhas de estocagem em formato *oblong* utilizando LES, e finalmente avaliar a dispersão das partículas provenientes de pilhas de estocagem e os fenômenos de suspensão, deposição e ressuspensão das partículas.

Em diversos momentos da metodologia e da apresentação dos resultados dois tempos distintos são utilizados no que se refere aos softwares que fazem parte do trabalho:

- a) Tempo de execução – É calculado por meio do valor do passo de tempo (normalmente em potências de 10^{-3} segundos), multiplicado pela quantidade de passos de tempo utilizados no processamento das simulações. A unidade final é dada em segundos.
- b) Tempo de processamento – Anotam-se as datas e hora de início e fim de processamento em que o programa executou, e calcula-se a diferença. É utilizado apenas um parâmetro de ordem de grandeza do tempo em que os softwares ficaram executando nas máquinas, não levando em consideração pequenas paradas de alguns minutos para extração de resultados e novas parametrizações, etc.

Obs.: Quaisquer outros tempos que não sejam o de execução ou processamento são discriminados, como tempo de experimento, tempo das menores escalas, etc.

4.1 Modelagem Euleriana do escoamento atmosférico

4.1.1 Condição inicial – Solução das equações com o modelo de turbulência $\kappa\omega$ -SST

Como condição inicial para a determinação do campo de velocidade e dispersão e dos parâmetros de turbulência para as simulações LES foi utilizado o modelo κ - ω SST. A Tabela 4.1 lista os valores das constantes empíricas utilizadas na modelagem do escoamento (ANSYS FLUENT, 2013), cujas equações foram descritas e detalhadas na Seção 3.1.2.1.

Tabela 4-1 – Valores das constantes do modelo de turbulência κ - ω SST. Fonte: Ansys Fluent (2013).

<i>Constante</i>	<i>Valor</i>
α	1
α^*	1
α_∞^*	1
$\beta_\infty^*, \beta_i^*, \beta^{*4}$	0,09
$\sigma_{\kappa,1}$	1,176
$\sigma_{\omega,1}$	2,0
$\sigma_{\kappa,2}$	1,0
$\sigma_{\omega,2}$	1,168
a_1	0,31
$\beta_{i,1}$	0,075
$\beta_{i,2}$	0,0828

O modelo $\kappa - \omega$ SST utiliza a formulação do modelo original $\kappa - \omega$ próximo à parede e modelo $\kappa - \varepsilon$ na região exterior. As principais modificações encontradas no modelo $\kappa - \omega$ SST são: (i) - viscosidade turbulenta para melhor representar os efeitos da tensão de cisalhamento; (ii) - adição de um termo difusivo na equação de transporte; (iii) - função para garantir que as equações do modelo sejam aceitáveis em ambas as regiões, exterior e próximo à parede.

Na entrada, os dados de velocidade, energia cinética turbulenta e dissipação foram obtidos de um cálculo num canal tridimensional simples. A geometria desse domínio computacional foi um paralelepípedo retângulo com as seguintes dimensões: 0,578 m (comprimento), 0,205 m (largura) e 0,578 m de altura. A condição de simetria foi aplicada à parede superior do domínio computacional. As laterais e solo foram considerados paredes fixas. Um valor de fluxo de massa correspondente a uma velocidade de 5,5 m/s foi utilizada para condição de

⁴ Os valores das constantes são iguais devido ao alto Re e hipótese de fluidos incompressíveis deste trabalho.

entrada. Essa velocidade foi escolhida conforme experimentos em túneis de vento, de modo que a velocidade a 0,4 m da parede inferior do domínio numérico seja igual à velocidade ao centro do túnel de vento (TURPIN, 2010), ou seja, 6,5 m/s. Para satisfazer as condições impostas por esta abordagem, a malha da parede foi refinada de modo que o primeiro ponto da malha esteja dentro da subcamada viscosa ($z^+ \leq 5$). A Figura 4.2 – (a) Malha acima da superfície da pilha no plano simétrico ($x=0$); (b) representa o domínio de simulação, com unidades adimensionais em função da altura da pilha. Observa-se no domínio um corte no plano médio para representação e detalhe da malha utilizada na parede da pilha (Figura 4.2-a) e um corte no solo em torno da pilha (Figura 4.2-b) em torno do domínio computacional. A malha foi produzida por extrusão de células triangulares.

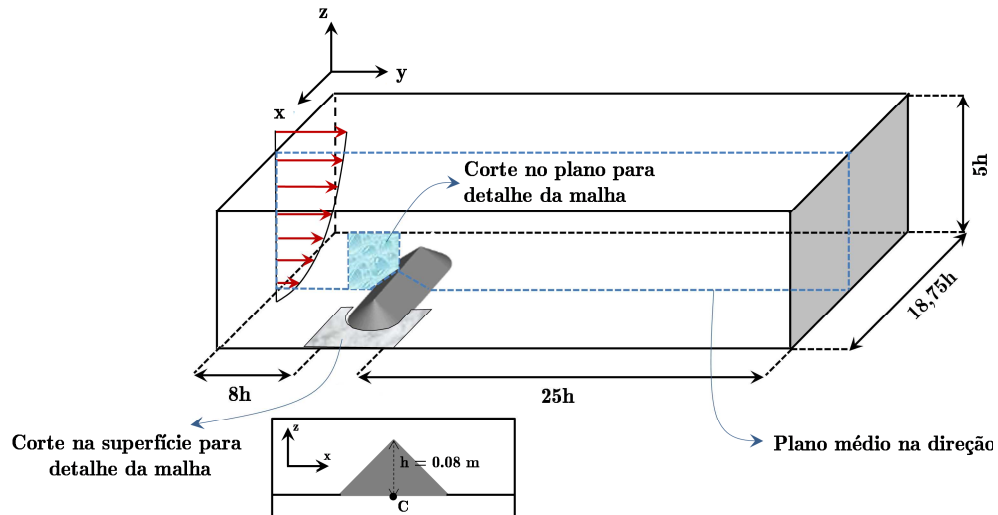


Figura 4.1 – Domínio da simulação com cortes em plano e superfície para detalhe da malha.

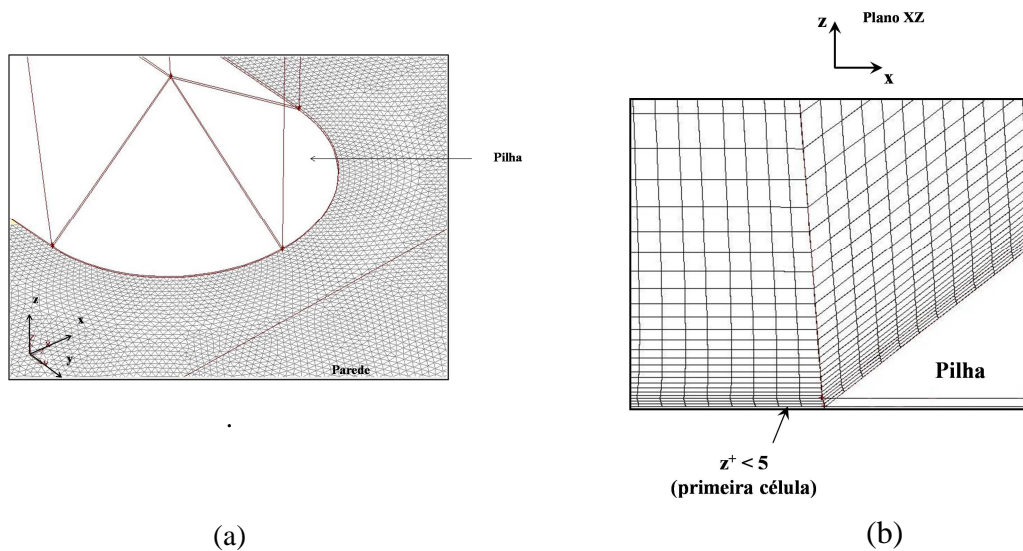


Figura 4.2 – (a) Malha acima da superfície da pilha no plano simétrico ($x=0$); (b) Malha no solo ($z=0$) em torno da pilha.

A Tabela 4-2 apresenta as condições de contorno da simulação numérica utilizada no modelo $\kappa - \omega$ SST.

Tabela 4-2 – Condições de contorno no domínio computacional para a simulação numérica utilizando o modelo de turbulência $\kappa - \omega$ SST.

<i>Localização no domínio</i>	<i>Condição de contorno</i>
Entrada	$\bar{U} = \frac{u^*}{\kappa} \ln \frac{z}{z_0} = 5,5; \quad \bar{V} = 0; \quad \bar{W} = 0;$ $\kappa = \text{perfil de túnel de vento}; \omega = \text{perfil de túnel de vento}.$
Saída	$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_i} = 0; \frac{\partial \kappa}{\partial x} = 0; \frac{\partial \omega}{\partial x} = 0$
Laterais	$\bar{V} = 0; \frac{\partial \bar{U}}{\partial y} = 0; \frac{\partial \bar{W}}{\partial y} = 0; \frac{\partial \kappa}{\partial y} = 0; \frac{\partial \omega}{\partial y} = 0$
Solo e Superfície da pilha	$\bar{U} = 0; \bar{V} = 0; \bar{W} = 0$
Topo	$\bar{W} = 0; \frac{\partial \bar{V}}{\partial z} = 0; \frac{\partial \bar{U}}{\partial y} = 0; \frac{\partial \kappa}{\partial z} = 0; \frac{\partial \omega}{\partial z} = 0$

Os processamentos foram executados no pacote *Ansys Fluent 14.0*, com as seguintes propriedades (Tabela 4-3):

Tabela 4-3 – Propriedades do processamento de execução do modelo de turbulência $\kappa - \omega$ SST.

<i>Propriedade</i>	<i>Comentários</i>
Modelo	$\kappa - \omega$ SST
Fluido	ar
Densidade	1,225 [kgm ⁻³]
Viscosidade	1.7894e-05 [kgm ⁻¹ s ⁻¹]
Método de Solução (Acoplamento Velocidade-Pressão)	SIMPLEC
Método de Interpolação P, U_i, κ, ω	Upwind 2ª Ordem

4.1.2 Solução das equações governantes utilizando o modelo de turbulência LES

As equações governantes do escoamento são solucionadas numericamente empregando-se o software comercial FLUENT 14.0 (Ansys Fluent, 2013), que emprega o método numérico denominado *Solver pressure-based*, baseado em volumes finitos (Versteeg & Malalasekera, 2007). O campo de velocidade é obtido da equação de momentum, enquanto o campo de pressões é obtido da equação de correção de pressão, por meio da manipulação das equações de continuidade e momentum. Essa técnica é baseada em volumes de controle, que consiste dos seguintes passos:

- 1) Divisão do domínio em volumes de controle discretos utilizando uma malha computacional;
- 2) Integração das equações governantes nos volumes de controle individuais, com o objetivo de construir as equações algébricas das variáveis desconhecidas (velocidade e pressão);

3) Linearização das equações discretizadas e solução do sistema linear de equações de modo a produzir a atualização das variáveis dependentes;

O método numérico empregado para linearizar e resolver a equação discretizada com implementação para malhas estruturadas e não estruturadas são baseadas no teorema de Gauss-Green (Federer, 1944), necessário para construção de valores de um escalar nas faces das células, além de cálculos de termos difusivos e derivadas de velocidades. O gradiente $\nabla\phi$ de uma variável ϕ é utilizado para discretizar os termos convectivos e difusivos das equações de conservação relacionadas ao escoamento. Os gradientes são calculados no centro da célula (c_0), na forma discreta, segundo a Eq. 4-1:

$$(\nabla\phi)_{c_0} = \frac{1}{V} \sum_f \bar{\phi}_f \vec{A}_f \quad \text{Eq. 4-1}$$

sendo $\bar{\phi}_f$ o valor de ϕ no centróide da face da célula (Eq. 4-2). A soma é realizada sobre todas as faces que envolvem a célula, conforme Eq. 4-2:

$$(\nabla\phi)_{c_0} = \frac{1}{V} \sum_f \bar{\phi}_f \vec{A}_f \quad \text{Eq. 4-2}$$

Um dos maiores desafios para a simulação de escoamentos atmosféricos é a representação do escoamento incidente de modo a representar o espectro de turbulência no problema proposto. De acordo com Tabor e Baba-Ahmadi (2010), uma das técnicas geralmente empregadas para representar o escoamento incidente é a geração artificial dos perfis turbulentos baseados na flutuação em torno dos valores médios, técnica empregada nesse trabalho. Este trabalho propôs utilizar a metodologia de geração de turbulência relacionada à velocidade na entrada, proposta por Smirnov, Shi e Celik (2001), denominado *Spectral Synthesizer*, conforme referencial detalhado na Seção 3.1.2.4.3.

Assim, as condições de entrada foram inseridas por um perfil médio e outro de flutuação de velocidade por meio do método *Spectral Synthesizer*. A apresentação das equações filtradas, característica do modelo de turbulência das grandes escalas, foi apresentada na Seção 3.1.2.4.1. A superfície sólida é tratada de forma automática pelo modelo de submalha utilizado, de modo que não há necessidade de função de amortecimento. O método de acoplamento velocidade-pressão utilizado foi o SIMPLEC (Patankar, 1980), avanço no tempo foi utilizado o método Implícito de 2ª Ordem e o método de interpolação para pressão Upwind de 2ª Ordem e de momentum o Diferenças Centrais. As hipóteses simplificadoras aplicadas foram as seguintes: (i) Fluido incompressível; (ii) Viscosidade laminar constante; (iii)

Condição de estabilidade neutra; (iv) Solução do escoamento atmosférico limitado à microescala. Informações complementares são listadas na Tabela 4-4.

Tabela 4-4 – Propriedades do processamento de execução do modelo de turbulência LES, como objetivo de geração inicial dos campos de velocidade.

<i>Propriedade</i>	<i>Comentários</i>
Modelo de turbulência	<i>LES Wale</i>
Constante do modelo (C_w)	0,325
Fluido	ar
Dimensões do domínio – Direção	
x	3,5 m
y	3,193 m
z	0,4 m
Densidade	1,225 [kgm⁻³]
Viscosidade	1.7894e-05 [kgm⁻¹s⁻¹]
Escala de Comprimento	0,064 m
Flutuações de velocidade	Perfil de entrada

4.2 Modelagem lagrangiana da dispersão atmosférica da partícula

4.2.1 Estimativa da taxa de emissão das partículas na superfície da pilha

Para a modelagem de dispersão pela abordagem lagrangiana é necessário conhecer inicialmente a taxa de emissão das partículas inseridas no domínio. Para isso, foi utilizado um método em que as partículas são injetadas no domínio a partir da superfície da pilha. A estratégia utilizada para injetar as partículas foi adaptada de trabalhos de Furieri (2012), Badr & Harion (2007) e Turpin & Harion (2009). Inicialmente foi levada em conta a quantidade de iso-superfícies (u_s/u_r) determinadas nas simulações numéricas de Turpin & Harion (2009). A Tabela 4-5 apresenta estes valores das iso-superfícies (u_s/u_r) em relação aos valores utilizados no modelo USEPA (2006a, 2006b) para quantificação das emissões e aqueles adotados por Turpin e Harion (2009).

De modo geral, a observação da Tabela 4-5 leva a conclusão que todas as células da iso-superfície que estiverem no intervalo genérico $a \leq u_s/u_r < b$, terão valor selecionado para aquela iso-superfície igual ao valor médio das extremidades, isto é: $u_s/u_r = (a + b)/2$.

Tabela 4-5 – Valores selecionados da relação u_s/u_r modificados em relação à metodologia USEPA de quantificação das emissões.

Modelo USEPA (2006)		Badr & Harion (2007) e Turpin & Harion (2009)	
Intervalo u_s/u_r	Valor selecionado	Intervalo u_s/u_r	Valor selecionado
$0,0 \leq u_s/u_r < 0,4$	0,20	$0,0 \leq u_s/u_r < 0,1$	0,05
		$0,1 \leq u_s/u_r < 0,2$	0,15
		$0,2 \leq u_s/u_r < 0,3$	0,25
		$0,3 \leq u_s/u_r < 0,4$	0,35
$0,4 \leq u_s/u_r < 0,8$	0,60	$0,4 \leq u_s/u_r < 0,5$	0,45
		$0,5 \leq u_s/u_r < 0,6$	0,55
		$0,6 \leq u_s/u_r < 0,7$	0,65
		$0,7 \leq u_s/u_r < 0,8$	0,75
$0,8 \leq u_s/u_r < 1,0$	0,90	$0,8 \leq u_s/u_r < 0,9$	0,85
		$0,9 \leq u_s/u_r < 1,0$	0,95
$u_s/u_r \geq 1,0$	1,10	$1,0 \leq u_s/u_r < 1,1$	1,05
		$1,1 \leq u_s/u_r < 1,2$	1,15
		$1,2 \leq u_s/u_r < 1,3$	1,25
		$1,3 \leq u_s/u_r < 1,4$	1,35
		$1,4 \leq u_s/u_r < 1,5$	1,45
		$1,5 \leq u_s/u_r < 1,6$	1,55
		$1,6 \leq u_s/u_r < 1,7$	1,65

Conforme já descrito na Seção 3.1.3, Furieri (2012) desenvolveu experimentos em túnel de vento relacionando o balanço de massa de partículas de areia em função do percentual de partículas erodíveis e não erodíveis (distribuição bimodal) para as velocidades na superfície livre de 6,7 e 8 m/s. Nesse modelo, foi calculado um valor para as constantes que representam b_1 , b_2 , c_1 e c_2 na Eq. 3-134 para todas as iso-superfícies da pilha.

$$P_{mod} = b_1(\%EP)^{b_2}(u^* - u_t^*)^2 + c_1(\%EP)^{c_2}(u^* - u_t^*) \quad \text{Eq. 3-134}$$

Esse trabalho propõe valores diferentes de b_1 , b_2 , c_1 e c_2 nas iso-superfícies em que há emissão de partículas, ainda tendo como referência os experimentos em túnel de vento de Furieri (2012). Os cálculos foram efetuados utilizando o seguinte algoritmo:

1 – Utilizar os experimentos em túnel de vento com tamanho de partículas bimodal em 4 (quatro) diferentes percentuais de partículas erodíveis (%EP), 90, 80,65 e 50% e três velocidades (6, 7 e 8 m/s), observando-se a massa emitida (M) da pilha para cada combinação de partículas erodíveis(%EP) e velocidade, gerando assim três curvas relacionando M x %EP;

2 – Após avaliação, a função que mais se adaptou à curva gerada aos pontos que relacionam M x %EP foi uma exponencial, na forma $M = a_1(\%EP)^{a_2}$, onde a_1 e a_2 são constantes de ajuste à curva.

3 – Com os dados das curvas foram levantados, através do Método dos Mínimos Quadrados, os valores das constantes a_1 e a_2 ;

4 – Com os valores das constantes a_1 e a_2 calculados, foi calculada a massa emitida para os percentuais iguais a 90, 80, 70, 60, 50, 40, 30, 20 e 10%. Vale ressaltar que os valores das constantes a_1 e a_2 são diferentes para cada velocidade;

$$\begin{cases} P = 58(u^* - u_t^*)^2 + 25(u^* - u_t^*), & \text{se } u^* > u_t^*; \\ P = 0, & \text{se } u^* \leq u_t^*; \end{cases} \quad \text{Eq. 3-129}$$

$$P_{mod} = b_1(\%EP)^{b_2}(u^* - u_t^*)^2 + c_1(\%EP)^{c_2}(u^* - u_t^*) \quad \text{Eq. 3-134}$$

5 - Calcular a massa emitida no modelo USEPA (Eq. 3-129), tendo como dados de entrada a relação u_s/u_r , a velocidade em altura de referência (u_{10}^+), as áreas das iso-superfícies e a velocidade de fricção limite. O cálculo das massas emitidas nas iso-superfícies permite também o cálculo da massa total emitida, pela soma das massas emitidas das iso-superfícies. A relação entre a massa emitida da iso-superfície pela massa total emitida dá o percentual de massa emitida pela iso-superfície (%EM).

6 – A massa emitida calculada no Passo 4 é multiplicada pelo percentual de massa emitida (%EM) do Passo 7. O resultado é o valor de quanto as iso-superfícies estão emitindo separadamente;

7 – Nesse passo o objetivo é calcular os coeficientes b_1, b_2, c_1 e c_2 mostrados na Eq. 3-134 para as iso-superfícies onde a velocidade de fricção é maior que a velocidade de fricção limite. Para isso o Método dos Mínimos Quadrados é novamente utilizado, de modo a minimizar o erro entre a massa emitida representada na função do Passo 2 e a massa emitida calcula pela função representada na Eq. 3-134 multiplicada pela área da iso-superfície. Esse passo é desenvolvido para todas as iso-superfícies onde há massa emitida. Nesse trabalho 8 (oito) iso-superfícies contém o valor da velocidade de fricção maior que a velocidade de fricção limite.

Vale ressaltar que o parâmetro mais importante desse trabalho, a velocidade de fricção, foi calculada segundo formulação USEPA (2006), já demonstrada na Eq. 3-130 e Eq. 3-131. No entanto, pode-se observar que há outro caminho para a obtenção deste parâmetro: o desenvolvimento dos cálculos por meio da Eq. 3-66. Porém, cálculos prévios na superfície da pilha demonstraram uma diferença de aproximadamente 3% entre os dois modos de cálculo

da velocidade de fricção - o modelo USEPA (2006) deu valor 3% menor. Assim, a metodologia de cálculo da velocidade de fricção permaneceu por meio do modelo USEPA (2006), uma vez que a diferença foi pequena entre as duas metodologias.

A Tabela 4-6 representa os valores das constantes para as iso-superfícies onde houve partículas emitidas e velocidade de escoamento na superfície livre (u_{10}^+) utilizada nesse trabalho (8 m/s):

Tabela 4-6 – Valores das constantes para as iso-superfícies								
$\begin{matrix} u_s/u_r \\ \text{const.} \end{matrix}$	0,35	0,45	0,55	0,65	0,75	0,85	0,95	1,05
b_1	0,016335	0,006578	0,005082	0,004099	0,00345	0,003293	0,002964	0,002378
b_2	3,798274	3,815632	3,387751	3,901526	3,901468	3,900547	3,886631	3,919426
c_1	0,000487	0,000234	0,000158	0,000156	0,000156	0,000118	0,000133	0,000137
c_2	3,863031	4,004731	2,861359	1,391355	1,389903	1,140482	1,881091	2,507199

No entanto, a massa emitida das iso-superfícies da pilha não é constante, havendo um decaimento dessa massa ao longo do tempo. Assim, ocorre uma diminuição da quantidade de partículas emitidas da pilha até que não haja mais partículas emitidas e/ou haja nova perturbação na pilha. Essa diminuição pode ser representada por uma função exponencial denominada decaimento temporal do fluxo de massa emitida, conforme estudos experimentais em túnel de vento, mostrados na Figura 4.3 (a) e (b) (FURIERI, 2012).

Os contornos destacados na pilha da Figura 4.3 (b) representam o que as partículas não erodíveis causam, em intervalos de tempo de 30 segundos, com um percentual de partículas não erodíveis de 20% e velocidade de 8 m/s. Observa-se que as partículas não erodíveis rolaram do topo para baixo ou emergiram devido à erosão do vento. Após um tempo de experimento de 10 minutos não há modificações significativas, o que está de acordo com a curva que representa o decaimento do fluxo de massa emitida, uma vez que há um decréscimo acentuado, tendendo a um valor insignificante de decaimento.

A Figura 4.3 (a) representa a curva exponencial indicando esse decréscimo levantado no experimento (Figura 4.3(b)), aproximada pelo Método dos Mínimos Quadrados. Através desse método os valores encontrados das constantes A e b da curva ($\dot{q} = Ae^{-bt}$) foram 839,3 e 0,339, respectivamente. Salientando que o percentual de partículas não erodíveis foi de 20% e velocidade de 8 m/s.

O gráfico da Figura 4.4 destaca o cálculo do fluxo de massa, agora denominado f, cujo objetivo é de se ter o valor do percentual da área sob a curva exponencial (intervalo de tempo $t_{i+1} - t_i$) em relação à área total sob a curva $\dot{q} \times t$ (intervalo T).

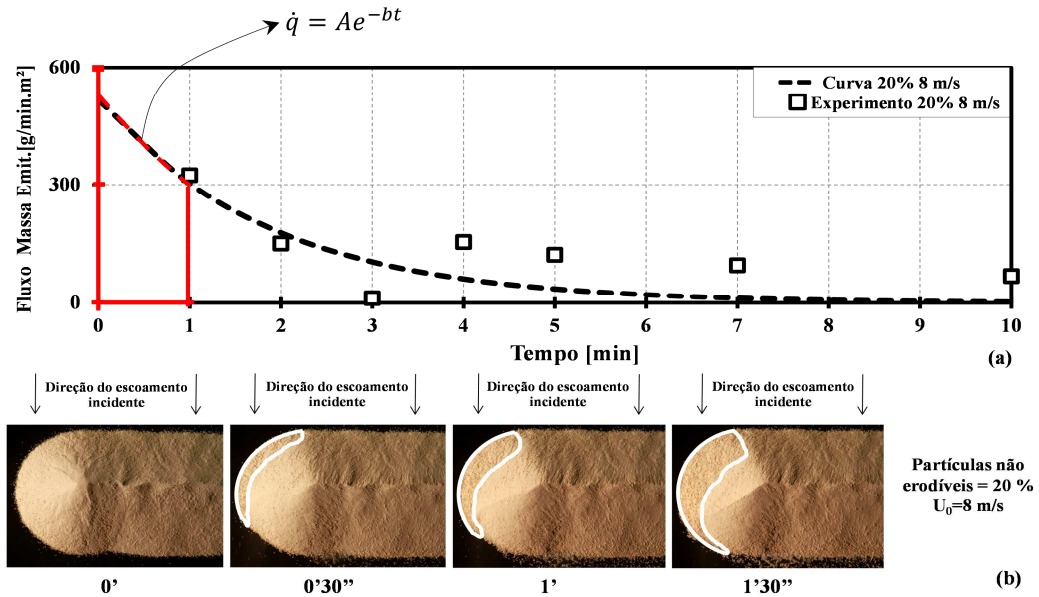


Figura 4.3 – Influência das partículas não erodíveis na evolução temporal do fluxo de massa emitida para velocidade de escoamento incidente de 8 m/s e 20% de partículas não erodíveis: a) Fluxo de massa emitido; b) Fotos de experimentos em túnel de vento. Fonte: Furieri (2012).

Nesse ponto são conhecidos: (i) A massa emitida pelas iso-superfícies; (ii) Área das iso-superfícies; (iii) Tempo total (T) de simulação (informado); (iv) Passo de tempo ($\Delta t = t_{i+1} - t_i$), a ser utilizado na simulação numérica (informado). Sendo assim, é possível calcular o fluxo de massa de partículas nas iso-superfícies. A área sob a curva é calculada conforme Eq. 4-3:

$$f = \int_{t=0}^T \dot{q} dt = \sum_{i=1}^N E(i) \quad \text{Eq. 4-3}$$

sendo f o Fluxo de massa do intervalo entre t_n e t_{n+1} ; T é o tempo total de decaimento do fluxo de massa emitido; \dot{q} – Fluxo de massa emitido; $N = T/\Delta t$ – Número de intervalos em que a área será subdividida; $E(i)$ – Emissão na iso-superfície em cada intervalo de tempo (Δt) entre t_n e t_{n+1} .

Assim, pode-se representar um conjunto de áreas sob a curva (Figura 4.4), de modo a calcular o fluxo de massa para as iso-superfícies, conforme expressões da Eq. 4-4:

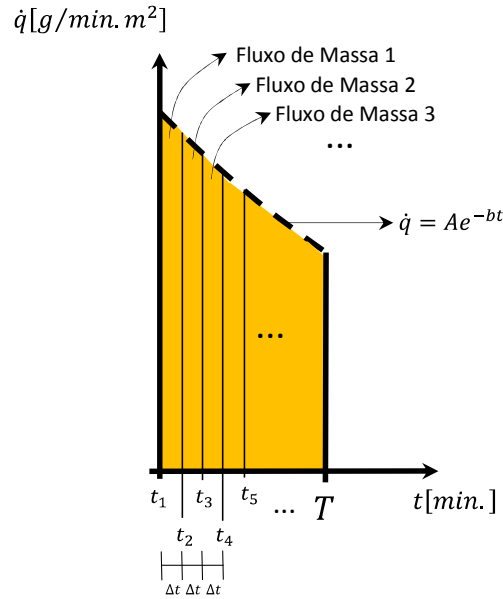


Figura 4.4 – Detalhe aumentado da Figura 4.3 (a) com a curva ajustada em função exponencial representando o decaimento temporal do fluxo de massa emitido.

$$\text{Perfil Transiente} \begin{cases} t_2 - t_1 = f_1 \rightarrow \text{Fluxo de massa} = f_1 E(1) \Delta t \\ t_3 - t_2 = f_2 \rightarrow \text{Fluxo de massa} = f_2 E(2) \Delta t \\ t_4 - t_3 = f_3 \rightarrow \text{Fluxo de massa} = f_3 E(3) \Delta t \\ \dots \end{cases} \quad \text{Eq. 4-4}$$

Resolvendo a integral da Eq. 4-3 no intervalo entre $t = t_i$ e $t = t_{i+1}$ e no intervalo entre $t = 0$ e $t = T$, tem-se a Eq. 4-5, cuja solução é imediata, uma vez que os valores de A , b e intervalo de tempo são conhecidos.

$$E(i) = \int_{t=t_i}^{t=t_{i+1}} \dot{q} dt = \int_{t=t_i}^{t=t_{i+1}} A e^{-bt} dt = \frac{A}{b} (e^{-bt_i} - e^{-bt_{i+1}}) \quad (\text{a})$$

$$E = \int_{t=0}^T \dot{q} dt = \int_{t=0}^T A e^{-bt} dt = -\frac{A}{b} e^{-bt} \Big|_0^T = \frac{A}{b} (1 - e^{-bT}) \quad (\text{b}) \quad \text{Eq. 4-5}$$

$$f_i = \frac{(e^{-bt_i} - e^{-bt_{i+1}})}{(1 - e^{-bT})} \rightarrow \begin{array}{l} \text{Área sob a curva num intervalo entre } t_i \text{ e } t_{i+1} \\ \text{Área sob a curva no tempo total } T \end{array} \quad (\text{c})$$

Para o cálculo do tempo de pavimento - tempo para que o fluxo de massa ($\varepsilon = 0,01 \text{ g/min.m}^2$) seja considerado desprezível, será utilizada a Eq. 4-6:

$$\varepsilon = \frac{a_1}{a_2} (1 - e^{-bT}) \rightarrow T = \frac{\ln(\varepsilon/a_1)}{a_2} \quad \text{Eq. 4-6}$$

Após os procedimentos dessa seção é possível escrever um novo algoritmo cuja saída é a massa emitida da pilha e o passo de tempo para as iso-superfícies, conforme Figura 4.5. O

Anexo II detalha as sub-rotinas. Vale ressaltar que o fluxo de massa gerado será inserido no processamento considerando a velocidade nula das partículas.

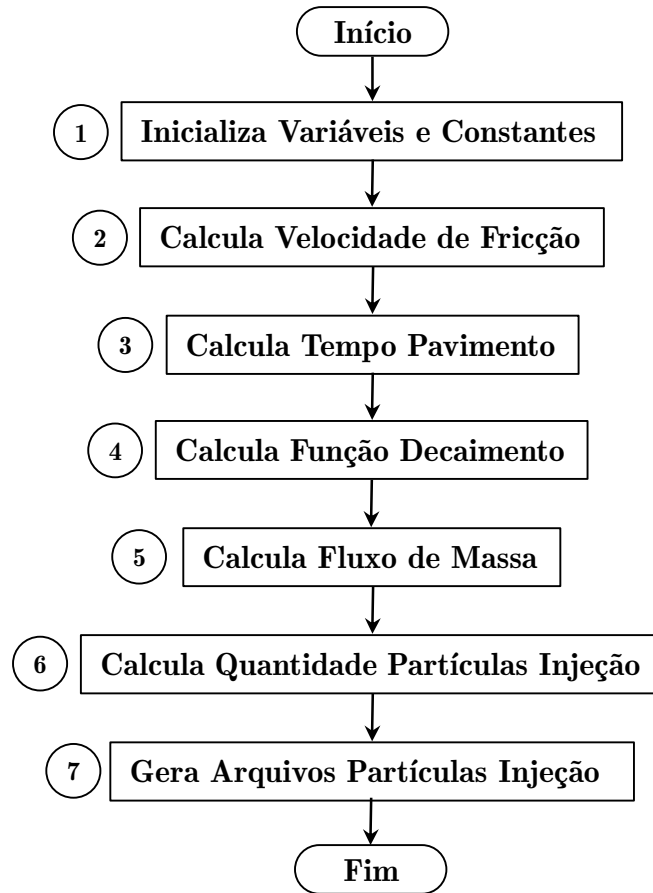


Figura 4.5 – Fluxograma para injeção de partículas na superfície da pilha

4.2.2 Determinação da trajetória da partícula

A equação da trajetória da partícula é resolvida por integração em discretos passos de tempo. Com a integração no tempo tem-se a velocidade da partícula a cada ponto juntamente com a trajetória, prevista pela Eq. 3-135 e Eq. 3-137, equações diferenciais ordinárias acopladas, podendo ser representadas segundo a Eq. 4-7:

$$\frac{dx_p}{dt} = u_p \quad \text{Eq. 3-135}$$

$$\frac{du_p}{dt} = F_D(u - u_p) + \frac{g(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + F \quad \text{Eq. 3-137}$$

$$\frac{du_p}{dt} = \frac{1}{\tau_p}(u - u_p) + a \quad \text{Eq. 4-7}$$

sendo a representante das outras forças por unidade de massa, excetuando-se a força de arrasto, e τ_p é o tempo de resposta de uma partícula à mudança no campo de escoamento, denominado tempo de relaxação da partícula.

Através de integração analítica e mantendo-se constantes a, u e τ_p no intervalo Δt , resolve-se a integral para o cálculo da nova posição u_p^{n+1} através dos seguintes passos (Eq. 4-8 a Eq. 4-13):

$$\frac{du_p}{dt} = \frac{(u - u_p) + a\tau_p}{\tau_p} \quad \text{Eq. 4-8}$$

$$\int_{u_p^n}^{u_p^{n+1}} \frac{1}{(u - u_p) + a\tau_p} du_p = \int_t^{t+\Delta t} \frac{1}{\tau_p} dt \quad \text{Eq. 4-9}$$

$$-\ln \left[\frac{(u - u_p^n) + a\tau_p}{(u - u_p^{n+1}) + a\tau_p} \right] = \frac{\Delta t}{\tau_p} \quad \text{Eq. 4-10}$$

Aplicando a operação inversa do logaritmo, tem-se a Eq. 4-11:

$$e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}} = \frac{(u - u_p^n) + a\tau_p}{(u - u_p^{n+1}) + a\tau_p} \quad \text{Eq. 4-11}$$

Finalmente, isolando o termo u_p^{n+1} , tem-se a Eq. 4-12:

$$u_p^{n+1} = u^n + (u_p^n - u)e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}} - a\tau_p \left(e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}} - 1 \right) \quad \text{Eq. 4-12}$$

Similarmente, a nova localização é representada na Eq. 4-13:

$$x_p^{n+1} = x_p^n + \Delta t(u^n + a\tau_p) + \tau_p \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}} \right) (u_p^n - u^n - a\tau_p) \quad \text{Eq. 4-13}$$

sendo u_p^n e u^n a velocidade da partícula e do fluido na posição anterior, respectivamente,

As soluções da Eq. 4-12 e Eq. 4-13 são resolvidas por esquema de discretização numérica. No caso desse trabalho, foi aplicada a discretização implícita trapezoidal, recorrendo à Eq. 4-8 em nova forma (Eq. 4-14):

$$\frac{u_p^{n+1} - u_p^n}{\Delta t} = \frac{(u^\theta - u_p^\theta)}{\tau_p} + a^n \quad \text{Eq. 4-14}$$

As médias u_p^θ e u^θ são calculados da Eq. 4-15 a Eq. 4-17:

$$u_p^\theta = \frac{1}{2}(u_p^n + u_p^{n+1}) \quad \text{Eq. 4-15}$$

$$u^\theta = \frac{1}{2}(u^n + u^{n+1}) \quad \text{Eq. 4-16}$$

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t u_p^n \nabla u^n \quad \text{Eq. 4-17}$$

Assim, tem-se a velocidade da partícula na nova posição $n + 1$ é calculada segundo a Eq. 4-18, e a nova posição na Eq. 4-19:

$$u_p^{n+1} = \frac{u_p^n \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\tau_p}\right) + \frac{\Delta t}{\tau_p} (u^n + \Delta t u_p^n \nabla u^n) + a \Delta t}{1 + \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\tau_p}} \quad \text{Eq. 4-18}$$

$$x_p^{n+1} = x_p^n + \frac{1}{2} \Delta t (u_p^n + u_p^{n+1}) \quad \text{Eq. 4-19}$$

4.2.3 Algoritmo de modelagem da fase partícula

Nas simulações realizadas com relação à troca de momentum entre a partícula e o solo assume-se que não existe força tangencial promovida pela parede agindo sobre a partícula. Assim, um impacto perfeitamente elástico é assumido e os coeficientes de restituição normal e tangencial são assumidos ser 1(um).

Os parâmetros necessários para a inserção de partículas no domínio são: (i) massa da partícula, (ii) densidade; (iii) tempo total em que as partículas serão inseridas no domínio; (v) direção de injeção das partículas – no presente trabalho foram inseridas sempre perpendiculares à área em que foram inseridas, e (v) fluxo de massa. O ato de inserir partículas no domínio é denominado injeção (a partir desse ponto o termo injeção será utilizado como significado de inserção de partícula no domínio). Nesse caso, o valor do fluxo de massa informado deve ser convertido automaticamente em número de partículas injetadas.

No entanto, por limitações computacionais, fica proibitivo acompanhar uma grande quantidade de partículas em uma simulação (no caso desse trabalho, unidades e até dezenas de milhões). Assim, o modelo utiliza o conceito de parcela, que é uma fração do fluxo de massa informada no passo de tempo com características comuns. A representação de toda a parcela é feita através de uma partícula, que determina o acompanhamento da parcela. Para calcular a concentração de partículas no domínio de estudo, considera-se a massa da parcela que uma partícula está representando. A parcela “virtual” é, então, representada por um ponto no domínio de estudo.

Assim, com os dados informados, são listados os passos para a modelagem da fase discreta e execução das simulações integradas com a fase fluido:

1) Informar posição inicial, velocidade e tamanho das partículas individuais. Essas condições iniciais, juntamente com os dados das propriedades físicas da fase partícula, são

utilizadas para os cálculos referentes à trajetória e transferência de massa baseados no balanço de força da partícula e nas condições da fase fluido.

2) Escolher o acoplamento fluido-partícula – Nesse trabalho, o escoamento influencia na fase discreta, mas o oposto não se verifica, uma vez que a quantidade de partículas diluídas no fluido satisfaz o critério utilizado em Segura (2004), onde o valor de $\alpha_v < 0,001$ (o presente trabalho tem valor de $\alpha_v = 8 \times 10^{-6}$). A transferência de momentum da fase contínua para a fase discreta é calculada por meio da mudança de momentum da partícula quando ela atravessa cada volume de controle, representada pela Eq. 3-137.

3) Escolher tratamento transiente da partícula – Uma vez escolhido esse tratamento, as partículas serão seguidas de modo que o passo de tempo da fase contínua coincida com o passo de tempo da fase discreta. Também é necessário observar o intervalo de tempo inicial e final que as partículas serão injetadas.

4) Inserir de parâmetros de integração da equação da trajetória da partícula:

a) Determinar o número máximo de passos de tempo – O cálculo da trajetória da partícula é abortado quando a partícula nunca deixa o domínio.

b) Determinar escala de comprimento – Parâmetro de controle de cálculo do passo de tempo para a integração dentro de cada volume de controle em que a partícula se encontra.

c) Considerar o arraste da partícula – Simplificações efetuadas na partícula, como por exemplo, tratar a partícula como esférica;

5) Incluir outras forças que agirão na partícula;

6) Definir o esquema de discretização – Os modelos de partícula são descritos por equações diferenciais ordinárias, enquanto a modelagem da fase contínua é definida por equações diferenciais parciais. Assim, o modelo de partícula utiliza o esquema de discretização Implícita Trapezoidal (mais detalhes na Seção 4.2.2).

7) Definir as condições de contorno – Quando a partícula encontra um domínio físico, algumas condições de contorno são definidas, para o caso desse trabalho, que trata de partícula inerte:

a) Supor que a partícula pode refletir via colisão elástica ou inelástica;

b) Considerar que a partícula pode sair do domínio, e, nesse caso, é desconsiderada dos cálculos a partir do ponto em que a partícula encontra o domínio.

8) Inicializar o escoamento do fluido e atualizar a fase discreta pela contínua - se a fase discreta não afeta a fase contínua, a posição da partícula é atualizada no final de cada passo de tempo.

9) Efetuar pós-processamentos – diversos programas em Fortran e Java foram desenvolvidos.

4.3 Validação da modelagem do escoamento e dispersão de partículas por meio de experimentos com leito de partícula em túnel de vento de Zhang, Wang e Lee (2007) e Cierco *et al.* (2008)

A simulação numérica em um leito de partículas foi realizada com o objetivo de validar a o escoamento e a dispersão de partículas referentes a este trabalho. Os dados da simulação foram comparados com experimentos de Zhang, Wang e Lee (2007) e Cierco *et al.* (2008).

Zhang, Wang e Lee (2007) e Cierco *et al.* (2008) investigaram a dispersão de material particulado de duas faixas de tamanho emitido por erosão eólica: diâmetros de 200–300 μm e 100–125 μm . Os autores analisaram a velocidade resultante das partículas, a concentração em volume, o fluxo de massa na direção do vento, todos em função da altura.

Para simular a camada limite atmosférica (CLA) neutra foi inserida uma camada de grama de 0,28 m x 0,5 m na entrada da seção de teste do túnel de vento. A camada de areia foi colocada na seção de teste com dimensões de 1 m (comprimento) x 0,2 m (largura) x 0,01 m (altura) acima da superfície, distante 5,5 m da entrada da seção de teste, de modo a dar equilíbrio ao escoamento incidente. O número de Reynolds, Rossby e de Froude ($Fr = u_\infty^2 / (gH) \leq 20$, para verificar a altura H da seção de teste) foram os parâmetros comparativos adimensionais para garantir similaridade entre modelo e protótipo. A altura da CLA foi de 0,20 m. A Tabela 4-7 lista alguns dados relevantes do experimento.

Tabela 4-7 - Características das partículas de areia para o experimento, considerando espessura da camada limite $\delta=0,20\text{m}$ e velocidade de fricção $u^*=0,29\text{ m/s}$.

	praia	deserto
Massa específica, ρ_p , em kg/m^3	2650	2700
Diâmetro, D_p , em μm	200-300	100-125
Rugosidade, z_0 , em m	0.0025	0.0025
Velocidade livre da partícula, U_0 , em m/s	8.05	6.5
Velocidade média na entrada, U_0 , em m/s	7 e 8	7 e 8

A seção de teste foi iluminada continuamente por uma fina emissão de luz por uma lâmpada halogênea, resfriada por um filtro. A luz fria foi alinhada com a direção principal do escoamento para visualizar as partículas de areia em movimento. Uma câmera CMOS (FASTCAM-APX) com resolução de 1024 x 512 pixels com 2000 frames por segundo com

tempo de exposição de 1/3000 s foi utilizada para captura das partículas iluminadas. O campo de visão foi de 136 mm x 78 mm. A Figura 4.6 ilustra esquematicamente o experimento:

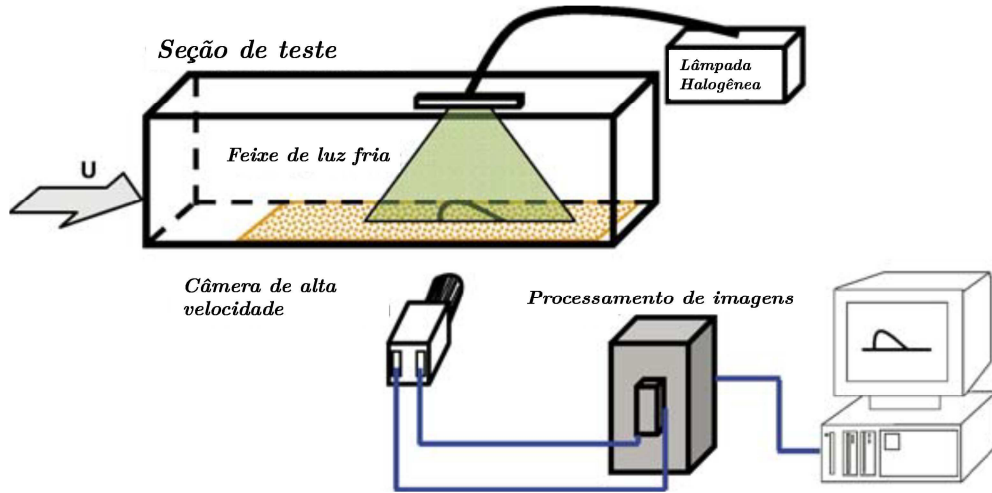
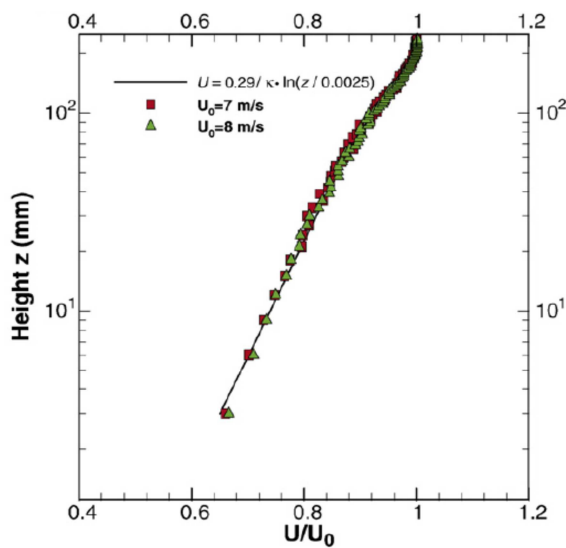
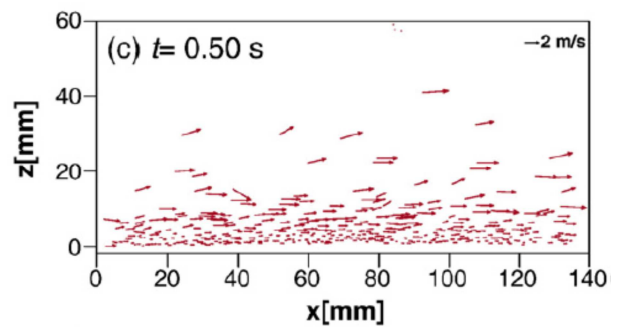


Figura 4.6 – Diagrama do experimento em túnel de vento. Fonte: Adaptado de Zhang, Wang e Lee (2007)

Os gráficos a serem comparados estão apresentados na Figura 4.7: *a)* Perfil de velocidade do vento a partir da velocidade na entrada, U_0 igual a 8 (oito) m/s, obtida através da relação $U(z) = u_*/(\kappa * \ln(z/z_0))$; *b)* Velocidade instantânea das partículas de areia de praia, em função da altura para $t=0.25$ s e velocidade de entrada $U_0=8$ m/s. O passo de tempo utilizado no experimento foi de 0,25 s; *c)* Perfil de concentração das partículas em função da altura. Nesse caso, o gráfico foi gerado através da sua densidade e volume por unidade de área; *d)* Fluxo de massa na direção do vento em função da altura, para partículas de areia da praia e do deserto com $U_0=8$ m/s.



(a)



(b)

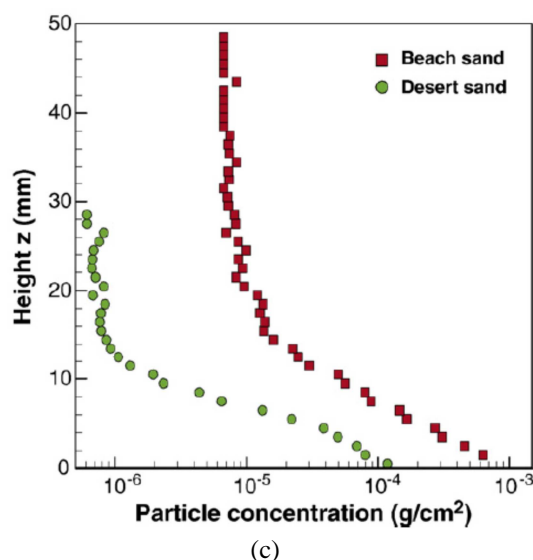


Figura 4.7 - a) Perfil de velocidade média do vento em função da altura da ABL; b) Campo de velocidade instantânea para partículas em salto; c) Concentração de partículas em função da altura;

No experimento de Zhang, Wang e Lee (2007), as partículas que estavam na área delimitada pela luz halogênea foram convertidas em pixels contidas no processamento das imagens. A concentração de partículas foi calculada dividindo-se o número de partículas pela área, e o volume foi obtido multiplicando-se a massa da partícula por essa concentração. As dimensões simuladas são de 0,136 m ao longo da direção x , 0,078 m na direção z e $2,5 \times 10^{-4}$ m na direção y .

As características do processamento foram: diâmetro da partícula igual a 10^{-4} m, fluxo de massa de 10 kg/s durante 0,5 s e passo de tempo igual a 0,005 s, velocidade na superfície livre de 8 m/s. O desenvolvimento do escoamento foi feito anteriormente, de acordo com parâmetros na Seção 4.1.2. O processamento foi salvo em intervalos de 0,25 s a partir do início da simulação, durante 15 segundos. Um arquivo com extensão .dat gerado no CFD Fluent 14.0 foi exportado, com seleção das seguintes colunas concernente à partícula, com objetivo de pós-processamento: número identificador, velocidades nas direções x , y e z , magnitude da velocidade, localizações x , y e z no domínio e tempo de residência. Após processamento foram desprezados os 5 segundos iniciais e utilizado os arquivos gerados dos 5 segundos seguintes.

A área simulada em *strips* de $h_s=0,005$ m e $L_s = 0,136$ m (Figura 4.8), semelhante ao domínio do experimento. Um algoritmo gerou os campos de concentração em função da altura (direção z). Conforme já explicado, uma luz incide na área em que as partículas são suspensas. Apesar de o autor considerar a espessura do fecho de luz muito pequena, foi necessário estipular uma espessura da “folha” de luz de 2×10^{-4} m (TURPIN, 2010). Para o

cálculo da concentração, um algoritmo lê os arquivos gerados, com o objetivo de contar todas as partículas dentro das *strips* no intervalo de 0,005 m na direção z , dividindo esse valor pela quantidade de *strips* daquele plano (média espacial), no tempo do intervalo (média temporal). Para o cálculo da velocidade média a estratégia é a mesma para a concentração de partículas, no entanto, o campo utilizado é a magnitude de velocidade. O detalhe das rotinas do algoritmo da Figura 4.9 está detalhado no Anexo III.

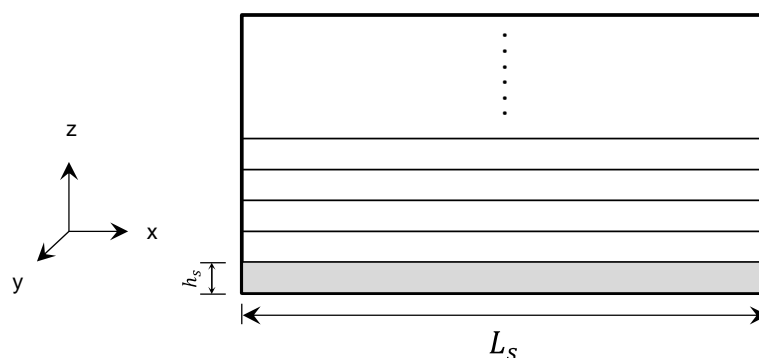


Figura 4.8 – Diagrama esquemático da área dividida em *strips* para cálculo da concentração e velocidade.

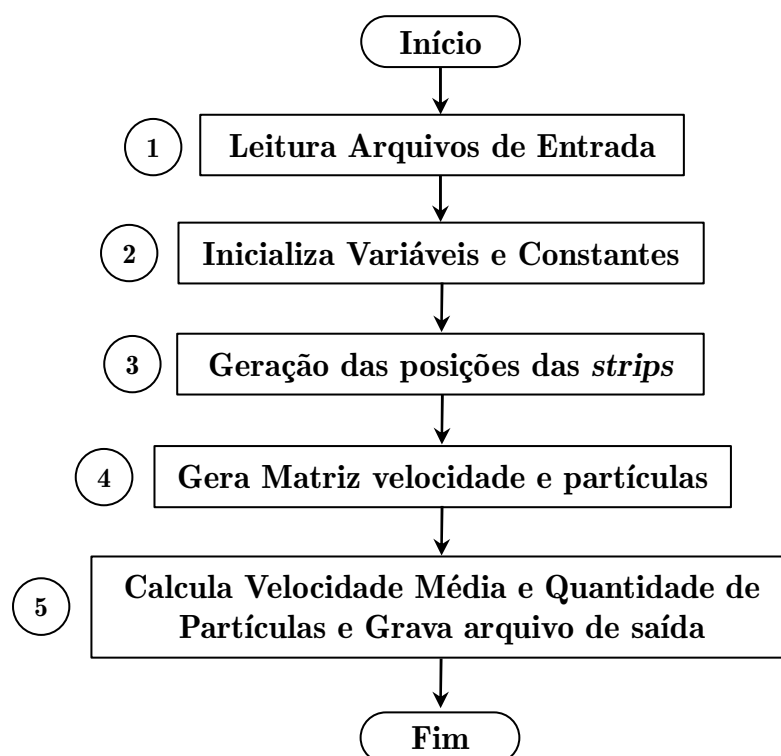


Figura 4.9 – Algoritmo de pós-processamento para cálculo da concentração de partículas.

4.4 Validação da modelagem do escoamento em pilhas de estocagem por meio de experimentos em túnel de vento realizados por Turpin (2010)

A simulação numérica do escoamento em pilha de estocagem foi validada por meio de experimento em túnel de vento de Turpin (2010). A Figura 4.10-a e b contém a representação esquemática do túnel de vento e dimensões totais: 0,80 m de altura, 1,5 m de largura e 8,12 m de profundidade. A simulação da camada limite turbulenta foi executada a montante da seção de testes (Figura 4.10-d), por meio da técnica denominada domínio precursor, com colocação de pequenos cubos, conforme Figura 4.10-c. Na configuração atual, as pilhas de estocagem estão sujeitas a escoamento na camada limite muito superiores à altura da pilha. O perfil de velocidade na zona de medição do túnel de vento foi efetuado por *Laser Doppler Anemometer* (LDA). A validação do perfil de velocidade é baseada na comparação com perfis experimentais de velocidade u e energia cinética turbulenta k reportada na literatura (SCHLICHTING, 1979).

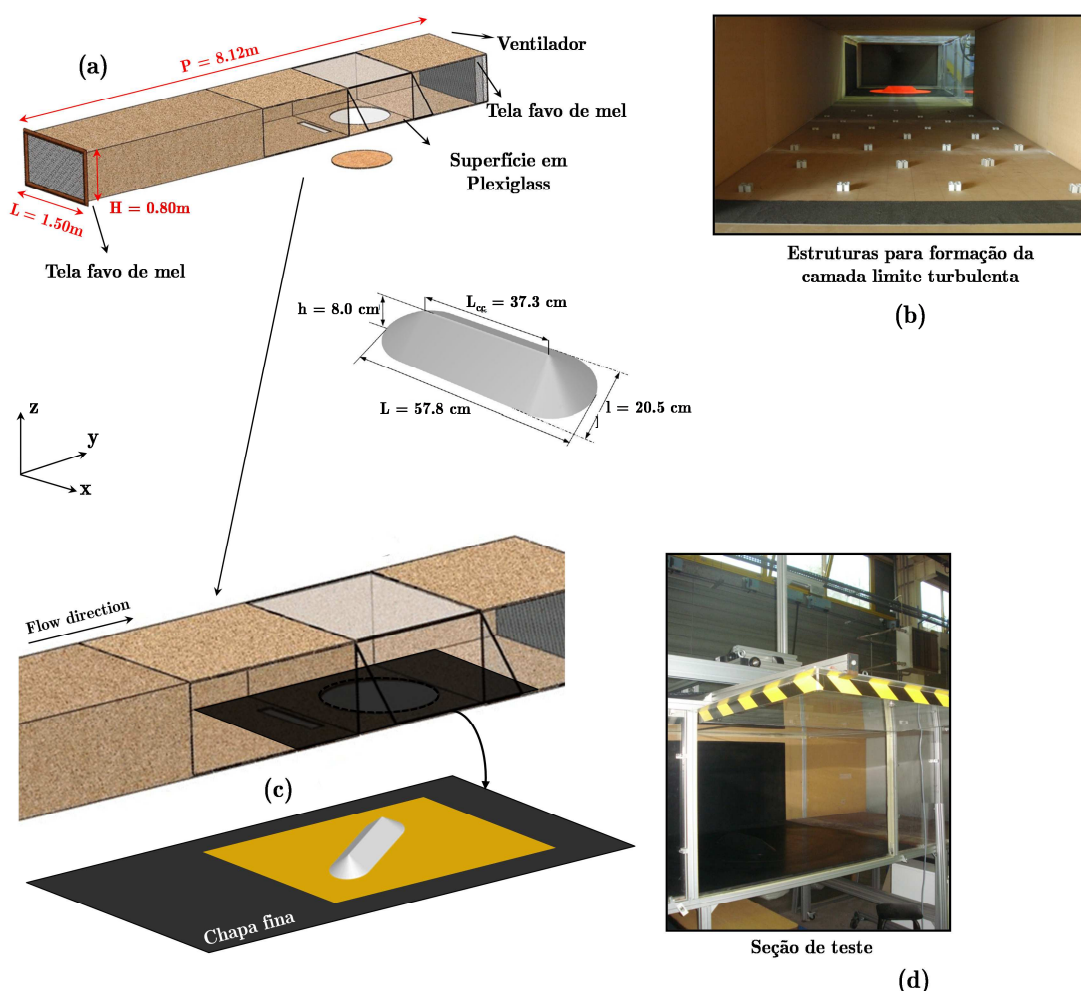


Figura 4.10 – Túnel de vento utilizado para simulação escoamento em pilhas de estocagem. Fonte: Turpin (2010).

A Figura 4.11 apresenta os perfis verticais de velocidade e flutuações de velocidades obtidas experimentalmente em 25 pontos. Um perfil de velocidade no centro do túnel de vento de 6 m/s , para a velocidade de fricção (u^*) igual a $0,24 \text{ m/s}$ e espessura da camada limite de $\delta = 160 \text{ mm}$. Próximo à superfície, o perfil de velocidade tem o perfil linear e afastado da superfície tem o perfil logarítmico (Figura 4.11-a). Próximo à parede o valor máximo de turbulência ($\sqrt{u'^2}/u_{centro}$) foi de 11%. A variação turbulenta no centro do túnel de vento foi de 2%.

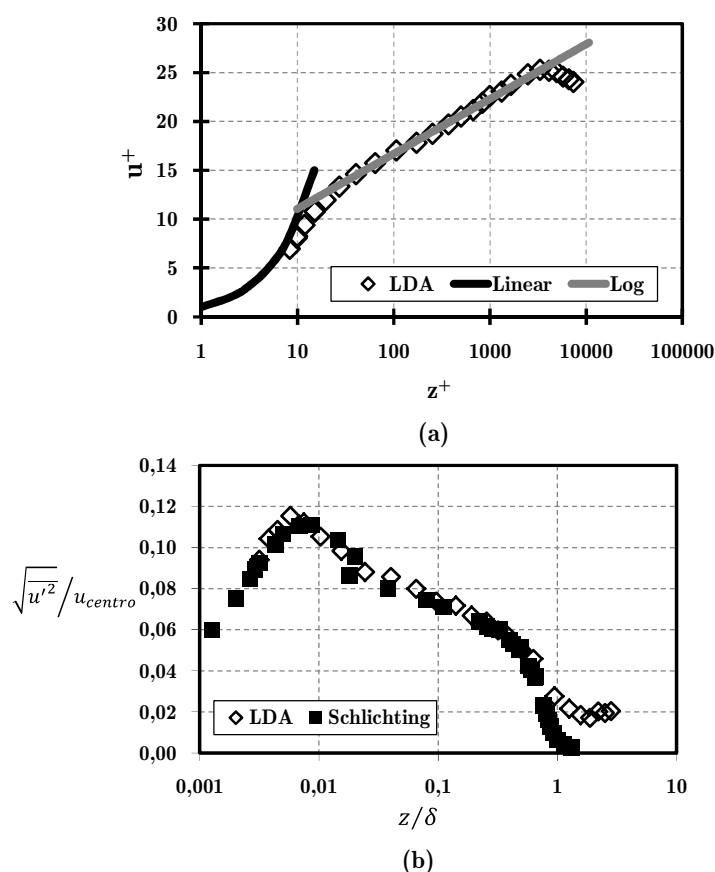


Figura 4.11 – Perfis experimentais médios e turbulentos na entrada da zona de medição do túnel de vento.

O objetivo do estudo foi estabelecer os dados experimentais para diversas configurações para uma ou mais pilhas em situações em que os efeitos tridimensionais são predominantes. O trabalho estudou diversas configurações com uma, duas ou três pilhas dispostas paralelamente e espaçadas $0,9h$, $1,8h$ ou $2,7h$, sendo h a altura da pilha. Três direções de escoamento do ar foram analisadas: 30° , 60° e 90° . A experiência visa medir os campos de velocidade em planos paralelos e perpendiculares à superfície (solo). A Figura 4.12 apresenta os planos e ângulos avaliados no experimento em relação à direção do escoamento.

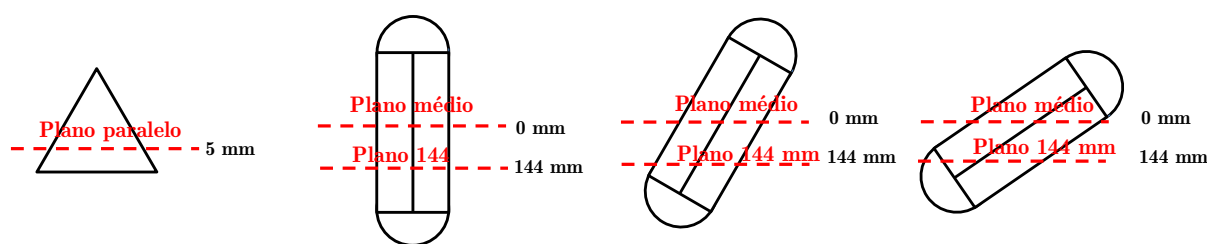


Figura 4.12 – Planos de medidas paralelos ao escoamento e perpendiculares e paralelos à superfície. Fonte: Adaptado de Turpin (2010).

Os instrumentos utilizados no experimento foram: PIV (*Particle Image Velocimeter*), câmera alta resolução (2048 x 2048 pixels) CCD Flowsense com filtro; pulso laser e o software *DynamicStudio* para tratamento de imagens. Um plano de aproximadamente 1 mm de espessura formada a partir do laser foi utilizado para iluminar as partículas no escoamento. Com o auxílio dessa fatia de luz muito fina, o escoamento é iluminado com as partículas traçadoras, sendo possível visualizá-las em dois momentos sucessivos de tempo (entre t e t').

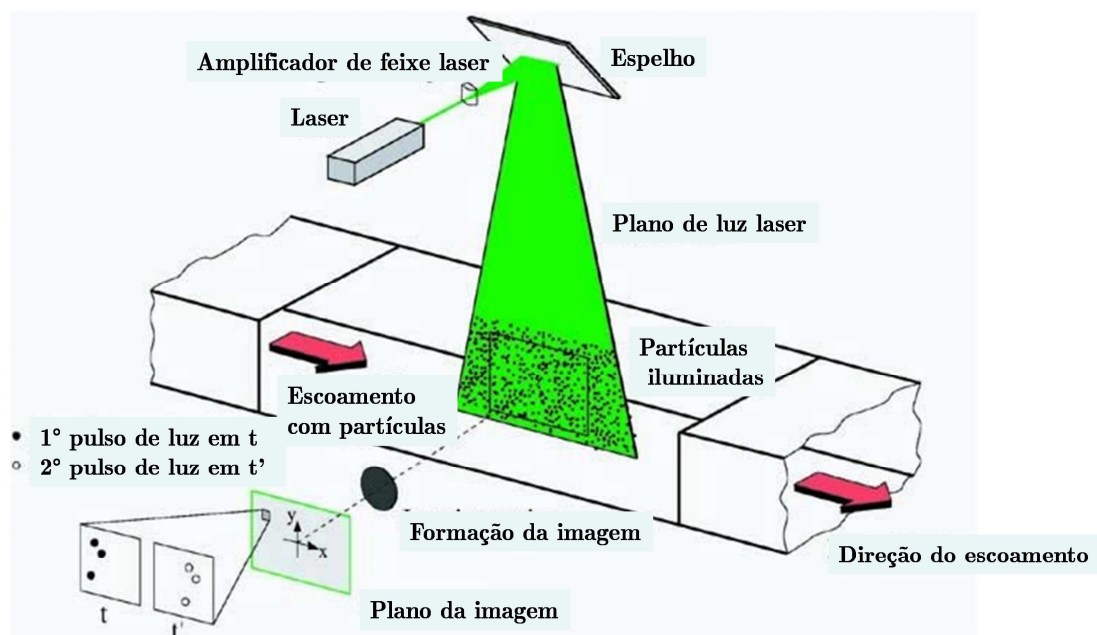


Figura 4.13 – Esquema de iluminação das partículas inseridas no domínio da seção de teste do túnel de vento.

A Figura 4.13 mostra o esquema de monitoramento das partículas iluminadas. As partículas são registradas e tratadas posteriormente em software de tratamento de imagens. A frequência de registro das imagens é de 4 Hz e o intervalo de tempo entre duas imagens é fixado em 120 μ s. O método de estimativa das emissões difusas utilizado foi o USEPA.

No entanto, foram observadas dificuldades nas medições perto da superfície sólida. Com efeito, por se aproximar da parede a concentração de partículas do traçador diminui, além do reflexo na superfície, prejudicial à luz laser. Além disso, há uma evolução muito rápida do

gradiente de velocidade na superfície, o que torna difícil bons resultados de correlação em toda a área de medição.

4.5 Sistema computacional de desenvolvimento

Para a realização das simulações deste trabalho, o ambiente computacional utilizou softwares diversos e um cluster com 12 computadores ligados em rede com sistema operacional Linux, distribuição CentOS. A Tabela 4-8 lista mais detalhes dos softwares utilizados.

Tabela 4-8 – Lista com softwares utilizados e objetivos dentro do escopo desse trabalho

<i>Nome do software</i>	<i>Observações</i>
Gambit 2.6	Geração da malha
MS Office	Texto, customização de gráficos de pós-processamento.
CFD Ansys Fluent 14.0	- Simulação numérica do modelo euleriano de escoamento; - Simulação numérica do modelo lagrangiano de partículas; - Pós-processamento do modelo euleriano de escoamento, gráficos qualitativos do modelo lagrangiano de movimentação das partículas.
Java IDE Netbeans	- Programa de simulação do modelo de emissão USEPA e geração de arquivo de entrada de partículas (acoplamento);
Fortran 90 (Plato IDE)	- Programa de pós-processamento dos modelos lagrangianos (cálculos quantitativos para análise de dispersão, deposição, suspensão e ressuspensão de partículas).

Com relação ao hardware, foi montado um cluster de computadores com sistema operacional Linux CentOS 2.6, instalado em 13 computadores, sendo 3 com processadores Intel i5-3570 1.6 GHz, 16 GB de memória RAM, HD 500 GB e memória cache 16 MB; 1 computador para pós-processamento e geração de malhas com 48 GB memória RAM, HD 500 GB e processador Intel Xeon 2.13 GHz e cache 16 MB. 11 máquinas com Intel i7 AMD 32 GB RAM e 16 MB memória cache. Em todos os computadores foram instalados, além do sistema operacional Linux CentOS 2.6, o pacote CFD Ansys com cinco licenças e 64 processos simultâneos. Os programas de pós-processamento foram executados em dois computadores com sistema operacional Windows 7.0, 16 GB de memória RAM e HD de 1 TB. Nessas máquinas foram instalados os softwares MS Office, Java com IDE Netbeans e Fortran 90 com IDE Plato.

4.6 Desenvolvimento de programas de pós-processamento para tratamento da movimentação de partículas

Conforme já explicado neste capítulo, as simulações numéricas do escoamento e dispersão das partículas foram feitos no software CFD Ansys Fluent 14.0, com alguns programas desenvolvidos separadamente para geração do arquivo de entrada para emissão de partículas injetadas no domínio, feito em programa Java. No entanto, as maiores necessidades foram de programas de pós-processamento para os resultados quantitativos da fase partícula, uma vez que a fase de pós-processamento da parte qualitativa foi plenamente atendida pelo software CFD. O Anexo III mostra o layout do arquivo, denominado inFileP, que foi gerado no Ansys Fluent 14.0 para análise da parte quantitativa da movimentação de partículas no entorno da pilha.

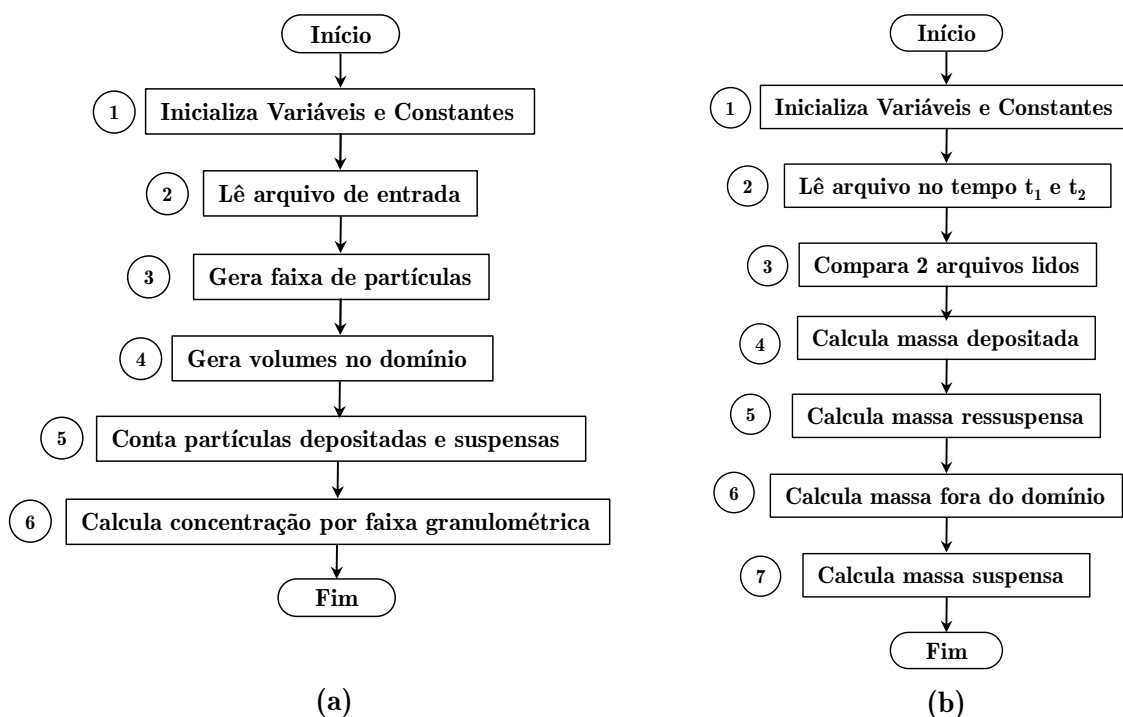


Figura 4.14 – Algoritmos para cálculo de concentração instantânea: (a) por faixa granulométrica, plano horizontal e vertical . (b) Concentração no domínio entre dois intervalos de tempo.

A Figura 4.14-a é um algoritmo geral de cálculo de concentração instantânea em diversos tempos de execução, e foi desenvolvido em Fortran 90. Os dados dos arquivos de entrada gerados no Ansys Fluent foram os seguintes: posição da partícula no domínio; magnitude de velocidade, número identificador da partícula; massa da parcela das partículas e diâmetro da partícula. Uma vez lido o arquivo de partículas, é gerada a faixa granulométrica de modo a possibilitar o cálculo da concentração de partículas para as faixas escolhidas. O passo seguinte foi gerar uma matriz com as coordenadas dos volumes nos quais serão “contadas” as

partículas localizadas no seu interior. Essa contagem é feita por faixa granulométrica. A concentração foi calculada dividindo-se a quantidade de partículas pelo volume em que as partículas estão localizadas, multiplicada pela massa da partícula. Diversos programas foram executados tendo esse formato geral de algoritmo, mudando a maneira de calcular a concentração no domínio. Algumas variantes do algoritmo foram: *i)* cálculo da concentração instantânea no solo por faixa granulométrica; *ii)* cálculo da concentração instantânea de partículas depositadas em todo o domínio por faixa granulométrica; *iii)* concentração espacial em planos paralelos a jusante da pilha e perpendiculares à direção do escoamento, por faixa granulométrica; *iv)* concentração total depositada e suspensa; *v)* cálculo da concentração para validação do trabalho de Zhang, Wang e Lee (2007), em planos horizontais paralelos à direção do escoamento.

A Figura 4.14-b representa um algoritmo em que são comparados dois arquivos de entrada gerados no Ansys Fluent, com o mesmo layout do algoritmo da Figura 4.14-a, sendo o primeiro gerado no tempo t_1 e o segundo no tempo t_2 , sendo a diferença entre os dois tempos de 0,5 segundo. Uma vez que eram conhecidos os números identificadores das partículas (id), foi possível comparar esses id's entre os dois tempos. Assim, foram observadas as partículas que estavam depositadas ou suspensas, por meio da referência da altura da partícula em relação à superfície sólida. Nesse caso, foram comparadas as alturas das partículas em relação ao raio da partícula. A partícula suspensa tinha altura maior que o raio da partícula, e depositada, caso contrário. No tempo t_2 foram feitas as mesmas análises, no entanto foram acrescentadas as observações da ressuspensão, quando as partículas que estavam depositadas em t_1 a jusante da pilha estavam suspensas em t_2 .

4.7 Resumo da Metodologia

A Figura 4.15 apresenta de forma resumida e em mapa conceitual a metodologia utilizada neste trabalho. A leitura do mapa pode ser feito de forma independente, ou em ordem cronológica, por meio da numeração nas conexões entre os conceitos representados nos retângulos.

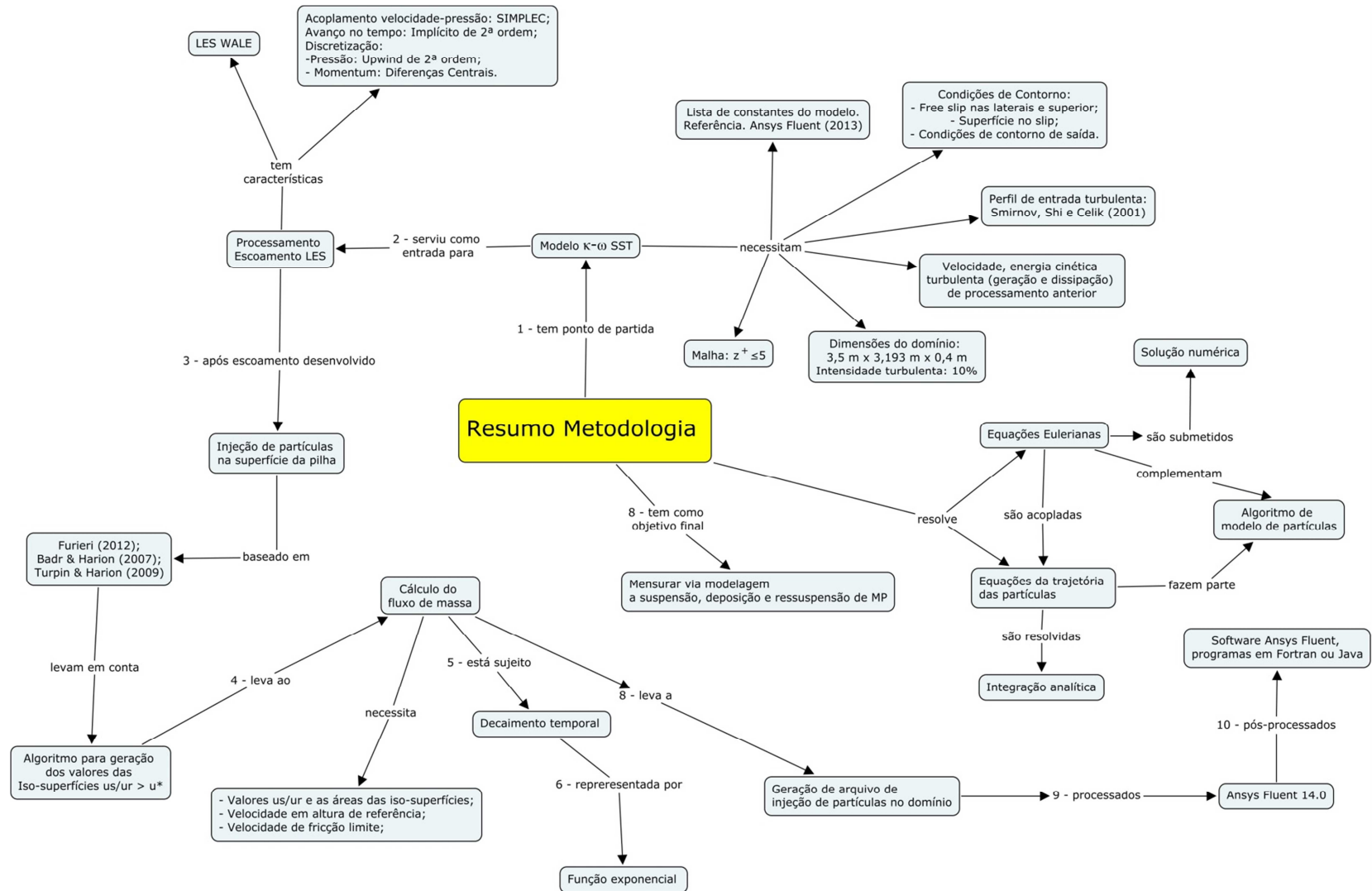


Figura 4.15 – Mapa conceitual representando a metodologia utilizada.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Este capítulo apresenta os resultados e discute os principais aspectos da suspensão, deposição, ressuspensão e dispersão de partículas provenientes de pilhas de estocagem geradas por erosão eólica. Nesse sentido, a Seção 5.1 apresenta os resultados da simulação numérica dos experimentos realizados por Zhang, Wang e Lee (2007), a fim de validar a metodologia proposta para modelar a suspensão, deposição, ressuspensão e dispersão de partículas; a Seção 5.2 apresenta os resultados da simulação numérica do escoamento ao redor de uma pilha de estocagem e realiza a validação dessa simulação por meio de experimentos em túnel de vento realizados por Turpin (2010). A Seção 5.3 contém análise e discussão dos resultados relativos à suspensão, deposição, ressuspensão e dispersão das partículas emitidas por erosão eólica a partir de pilhas de estocagem.

5.1 Simulação numérica de experimento realizado por Zhang, Wang e Lee (2007)

Foi simulado numericamente o experimento em túnel de vento realizado por Zhang, Wang e Lee (2007), que investiga a erosão eólica de partículas com diferentes diâmetros provenientes de um leito de partículas. Essa simulação foi utilizada neste trabalho para validar a metodologia proposta para modelar o escoamento atmosférico (modelo euleriano), a emissão de partículas - modelo de emissão USEPA modificado proposto por Furieri (2012) e a dispersão atmosférica (modelo lagrangiano).

Para a simulação numérica do experimento em túnel de vento de Zhang, Wang e Lee (2007), foram utilizadas as mesmas dimensões da seção de teste do túnel de vento utilizado no experimento (largura x altura x comprimento = 0,72 m x 0,6 m x 6,75 m). Foram desenvolvidos dois tipos de malha na simulação do domínio: tetraédrica e hexaédrica, com um total de 4,2 milhões de Volumes de Controle (VC). Não houve necessidade de teste de malha, uma vez que a malha foi obtida de Furieri (2012), e essa por sua vez já tinha sido validado. A malha foi gerada por um software desenvolvido em planilha Excel®, que gera arquivo com as posições da malha no formato de entrada do software Gambit 2.4®. O número de Reynolds foi de $3,28 \times 10^5$ (velocidade de 8 m/s e comprimento característico de 0,6 m).

Para a modelagem de turbulência LES do escoamento, foi utilizado inicialmente o modelo $k-\omega$ SST. Os cálculos desenvolvidos com esse modelo de turbulência são justificados pelo fato de já ter sido validado em trabalhos com geometrias similares (Turpin, 2010; Furieri, 2012).

Conforme já descrito na Seção 4.1.1, o modelo leva em consideração a solução de duas equações de transportes, uma para energia cinética turbulenta (k), semelhante ao modelo k - ε , e outra para dissipação (ε) por unidade de energia cinética turbulenta (ω).

Uma vez desenvolvido o escoamento pelo modelo k - ω SST, ele serviu de condição inicial para a modelagem da turbulência LES. O método de geração da turbulência na entrada do LES foi proposto por Smirnov, Shi e Celik (2001) e implementado no software CFD (Ansys Fluent, 2013) com o nome de *Spectral Synthesizer*, conforme referencial descrito na Seção 3.1.2.4.3. Em ambas as simulações (k - ω SST e LES) o perfil de entrada da velocidade média e flutuações foram obtidos de Turpin (2010), que por sua vez foi validado de trabalhos experimentais.

O tempo de processamento foi dividido em três partes: A primeira parte corresponde ao processamento inicial do modelo k - ω SST, com aproximadamente dois meses para a abordagem euleriana do escoamento. Esses dados serviram para início do modelo de turbulência LES, onde foram executados aproximadamente 50000 passos de tempo, sendo de 15 a 20 segundos para cada passo de tempo. Foi simulado aproximadamente 100 segundos (tempo de execução). A terceira parte foi a de injeção de partículas no domínio e simulação das partículas no leito, nos mesmos locais do experimento de Zhang, Wang e Lee (2007). Foram injetadas aproximadamente 10 kg/s de partículas, durante 0,5 segundo, com velocidade nula. Foi simulado aproximadamente 15 segundos após a injeção de partículas no domínio.

A Figura 5.1 apresenta o perfil de velocidade média em função da altura na entrada do domínio. Observa-se boa concordância com o perfil experimental de Zhang, Wang e Lee (2007). A espessura da camada limite é de aproximadamente $\delta = 200$ mm, quando a velocidade não sofre mais influência da superfície.

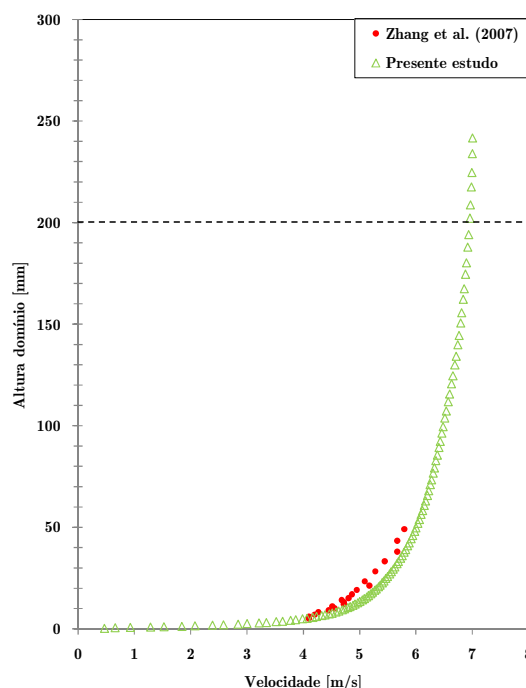


Figura 5.1 – Perfil de velocidade média em função da altura. A linha horizontal tracejada representa a espessura da camada limite.

A Figura 5.2 representa os perfis de intensidade turbulenta obtidos por meio da simulação numérica e do túnel de vento. O cálculo da intensidade turbulenta (Tu), representada em percentual, foi efetuado segundo a Eq. 5-1. Pode-se observar um valor máximo de turbulência aproximadamente de 11% para o experimento e de 12% para a simulação. Também é possível observar um maior decaimento próximo à parede, com diminuição da taxa de decaimento a partir de 40 mm de altura.

Apesar dos resultados visualmente serem um pouco discrepantes entre a altura de 50 mm e 170 mm, vale ressaltar que o eixo da abcissa tem os seus valores de intensidade turbulenta na forma percentual, o que significa dizer que as maiores diferenças nesse intervalo de altura são em torno de 2% entre a simulação e o experimento. Também justificam esses valores simulações numéricas do próprio método (Smirnov, Shi e Celik, 2001) em placas planas, quando comparados aos trabalhos experimentais de Ramaprian *et al.* (1981), cujos resultados apresentaram diferenças semelhantes entre a simulação numérica e os experimentos utilizados para validar o método. A geração da turbulência com o modelo LES WALE teve 97 segundos de tempo de execução.

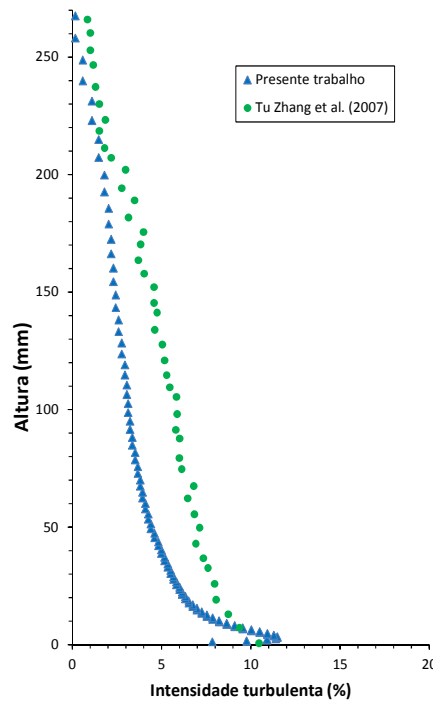


Figura 5.2 – Intensidade turbulenta em função da altura na entrada do domínio.

$$Tu = \frac{\sqrt{u'^2}}{U_0} \times 100 \quad \text{Eq. 5-1}$$

sendo u' a flutuação de velocidade e U_0 a velocidade de escoamento na superfície livre.

Após a verificação dos perfis verticais de velocidade média e de intensidade turbulenta na entrada do domínio computacional, a fase seguinte foi composta dos procedimentos necessários para a simulação da dispersão de partículas. Com esse fim, foi escolhido um diâmetro médio de $112,5 \mu m$, semelhantes ao experimento em túnel de vento, partículas de areia de tamanhos entre 100 e $125 \mu m$. Essas partículas foram injetadas no leito de partículas (dimensões $1000 \text{ mm} \times 200 \text{ mm}$ de largura, localizada a distância de 5500 mm da entrada do domínio) à taxa de 10 kg/s durante $0,5$ segundo com velocidade nula. Vale ressaltar que, conforme já explicado na Seção 4.2.3, essa taxa não é convertida diretamente em quantidade de partículas (conceito de parcelas).

A contagem das partículas foi efetuada na mesma localização da câmera, onde foram capturadas as imagens das partículas erodidas na direção do escoamento ($136 \text{ mm} \times 78 \text{ mm}$, à distância de 818 mm do início do leito de partículas). No entanto, na metodologia descrita em Zhang, Wang e Lee (2007) não foi mencionada a espessura da folha de luz utilizada no experimento.

Esse fato dificultou a validação dos resultados do modelo, uma vez que os dados de saída do modelo contêm a localização das partículas no espaço, não sendo possível verificar se uma partícula estava localizada num plano no interior do fecho de luz, ou seja, não havia um intervalo definido no espaço no qual fosse possível verificar a presença da partícula.

Vários trabalhos que utilizam experimentos semelhantes ao utilizado na validação informam que existe uma espessura em que pode ser considerada o fecho de luz, como em Cierco *et al.* (2008) e Turpin (2010). Desse modo, apesar do trabalho de Zhang, Wang e Lee (2007) não ter informado a espessura (cálculo da concentração foi efetuado como o número de partículas multiplicado pela massa, por unidade de área), foi considerado neste trabalho o valor de 0,25 mm.

Esse valor de 0,25 mm corresponde, então, à espessura do fecho de luz na direção transversal do domínio (eixo y). A altura (eixo z) também foi dividida, nesse caso em intervalos de 0,5 mm, conforme proposto em Cierco *et al.* (2008). Esse pequeno paralelepípedo (denominado de *strip*), tem o comprimento de 136 mm, 0,5 mm de altura por 0,25 mm de profundidade e a concentração em cada ponto é a quantidade de partículas contida nessa *strip*.

Vale ressaltar que no cálculo da concentração foi feito uma média espacial (quantidade de partículas encontradas a cada intervalo de altura de 0,5 mm, dividido pela quantidade de *strips* dessa altura). Também foi calculada uma média temporal, uma vez que foram feitos 53 salvamentos das simulações em intervalos de 0,25 segundos cada. Após essas considerações foi desenvolvido um programa para o cálculo do perfil de concentração em função da altura, conforme já descrito na Seção 4.3.

Cada ponto no gráfico log-linear da Figura 5.3 representa a concentração em g/cm^2 de um *strip* em que as partículas estão contidas, em função da altura do domínio da simulação.

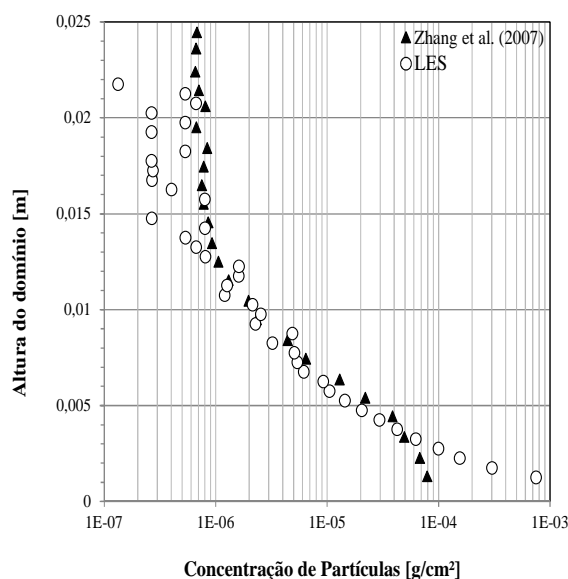


Figura 5.3 – Concentração de partículas em função da altura do domínio da simulação

Pode-se perceber na Figura 5.3 uma discrepância entre os resultados da simulação e do experimento nos primeiros 4 mm a partir da superfície. Algumas explicações podem ser atribuídas a essa diferença e precisam de maior investigação: (i) O modelo de colisão elástico utilizado. Nesse caso, as partículas ao tocar o solo refletem com igual momentum, podendo concentrar mais partículas acima da superfície, mas ainda em suspensão, diminuindo a quantidade de partículas mais próximas à superfície; (ii) A falta de dados completos de perfil de velocidade devido a dificuldades técnicas associadas à medição da velocidade das partículas próximas à superfície com PIV (ZHANG, WANG e LEE, 2007; TURPIN, 2010); (iii) O modelo de injeção de partículas pode influenciar o comportamento das partículas muito próximas à superfície (metodologia de parcelas). Para considerar uma partícula na superfície (em repouso ou não), foram verificadas quais parcelas tem distância à superfície menor ou igual ao raio da parcela, que na verdade representa todas as partículas com as mesmas características; (iv) Diferenças na metodologia de validação da concentração, uma vez que Zhang, Wang e Lee (2007) consideraram um fecho de luz de espessura desprezível para a montagem do perfil da concentração, o presente trabalho utilizou média espacial e espessura do fecho de luz de 0,25 mm, seguindo os autores Turpin (2010) e Cierco *et al.* (2008); (v) A média temporal o autor utilizou 300 imagens de um total de 4096 imagens, além de três repetições, enquanto este trabalho utilizou média temporal (53 processamentos consecutivos com intervalos iguais ao do experimento) e espacial (foi utilizado todo o domínio); (iv) A interação partícula-ar, considerado no experimento de túnel de vento de Zhang, Wang e Lee (2007) e não considerado nas simulações do presente trabalho.

No entanto, a partir da altura de 3 mm, boa concordância foi observada, uma vez que o perfil de concentração da simulação manteve a tendência de acompanhar a curva do experimento, apesar de poucos pontos discordantes a partir entre 15 mm e 20 mm de altura.

Vale ressaltar que a concentração máxima próxima à parede e o rápido decaimento da concentração com a altura foram bem representados pelas simulações numéricas. As concentrações obtidas a partir da altura de 3 mm estão no intervalo entre $5 \times 10^{-4} \text{ g/cm}^2$ e $9 \times 10^{-6} \text{ g/cm}^2$, até a altura de 20 mm.

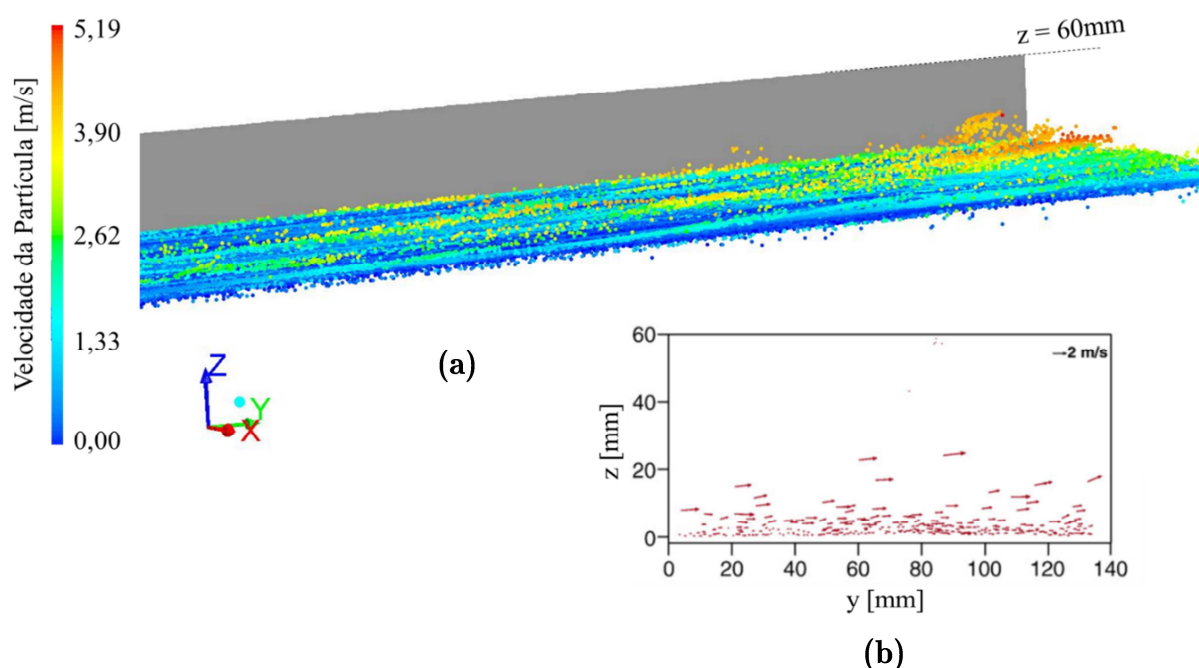


Figura 5.4 (a) – Distribuição das partículas em um determinado instante obtida no presente trabalho; (b) – Representação experimental da movimentação das partículas.

5.2 Escoamento ao redor da pilha de estocagem

A Figura 5.5 representa o domínio computacional utilizado para simular o escoamento atmosférico ao redor de uma pilha de estocagem. Vale ressaltar que as condições de contorno foram semelhantes àquela utilizada na simulação numérica de leito de partículas. As dimensões da pilha de estocagem estão na escala 1:200 de uma pilha real com as dimensões: 0,578 m (comprimento), 0,205 m (largura) e 0,08 m (altura). A pilha possui ângulo de repouso de 38° .

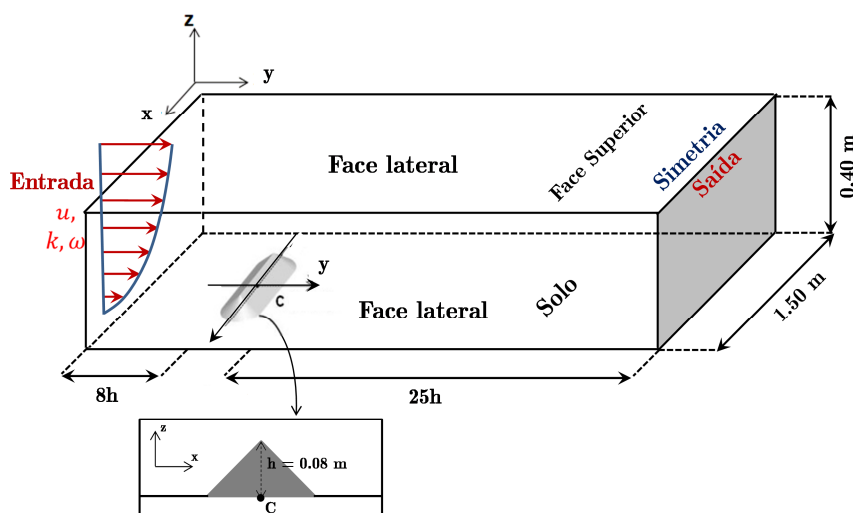


Figura 5.5 – Configuração do domínio computacional e condições de contorno. Fonte: Adaptado de Furieri (2012)

O esquema da Figura 5.5 representa pilhas de estocagem encontradas em áreas reais de manipulação de minério e carvão de indústrias siderúrgicas e as dimensões do domínio correspondem às dimensões do túnel de vento onde experimentos foram desenvolvidos em PIV (TURPIN, 2010) que serviram de validação para as simulações numéricas deste trabalho. As dimensões das zonas anterior, posterior e superior à pilha foram escolhidas de modo a garantir que não haja influência do tamanho do domínio nos resultados. As condições de contorno foram semelhantes ao processamento inicial com o modelo $k-\omega$ SST.

O tempo de processamento foi observado inicialmente com a simulação do modelo LES (com a inserção do escoamento desenvolvido no modelo $k-\omega$ SST), onde foram executados aproximadamente 150.000 passos de tempo, sendo de 15 a 20 segundos gastos para cada passo de tempo. Foi simulado aproximadamente 100 segundos para simulação do escoamento. A segunda parte foi a injeção de partículas no domínio com velocidade nula. Essa injeção ocorreu simultaneamente ao escoamento, de modo que as partículas eram erodidas da pilha e inseridas no domínio. Foram simulados aproximadamente 5 segundos de emissão da pilha de estocagem, sendo salvos em intervalos de 0,5 segundos.

Estudos recentes de escoamento turbulento mostram que muitos das suas importantes propriedades cinemáticas e dinâmicas podem ser mais bem entendidas por meio da descrição do escoamento em termos de “eventos” individuais ou padrões de linhas de corrente. São exemplos de tais eventos: (i) vorticidade; (ii) altas velocidades em combinação com cisalhamento; (iii) altas tensões de Reynolds. Estes estudos se justificam porque estão associados às propriedades médias dos fluidos (energia cinética, tensão de Reynolds ou processos particulares do escoamento) (HUNT *et al.*, 1988). Assim, é importante estimar a

acurácia e características das propriedades da turbulência e representação do campo de escoamento.

O escalar *Q-criterion* é utilizado para visualizar campos turbulentos tridimensionais. Esse escalar é importante sobre contornos de vorticidade ou campos de pressão. Quando grandes gradientes de pressão estão presentes em escoamento local de áreas de baixa pressão (por exemplo, devido à presença de um vórtice) pode ser difícil a visualização desse escoamento. Também o uso da vorticidade para visualizar as estruturas no escoamento pode ser problemático. Por exemplo, no escoamento da camada limite, espera-se encontrar ocorrências de vorticidade na direção z : $\omega_z = \partial v / \partial x - \partial u / \partial y$. Mas, uma vez que o gradiente de u na direção y é maior próximo à parede (camada limite) e na região de mistura, qualquer vorticidade será sobreposta. Assim, define-se *Q-criterion* por meio da Eq. 5-2:

$$Q = -\frac{1}{2}(S_{ij}S_{ij} - \Omega_{ij}\Omega_{ij}) = -\frac{1}{2}\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad \text{Eq. 5-2}$$

sendo

$$S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) = \text{Sim}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right) \quad \text{Eq. 5-3}$$

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) = \text{Asym}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right) \quad \text{Eq. 5-4}$$

Quando *Q-criterion* é positivo ele representa localizações no escoamento onde a rotação (Ω_{ij}) se sobressai em relação à tensão de cisalhamento (S_{ij}). A Figura 5.6 mostra a representação dos vórtices ao redor de uma pilha de estocagem. Por meio de um escalar utilizado para observar os vórtices nos escoamentos. A escala à esquerda no gráfico demonstra que o valor do parâmetro varia de 0,07 a 4. É importante ressaltar que o valor do escalar *Q-criterion* deve ser maior que zero.

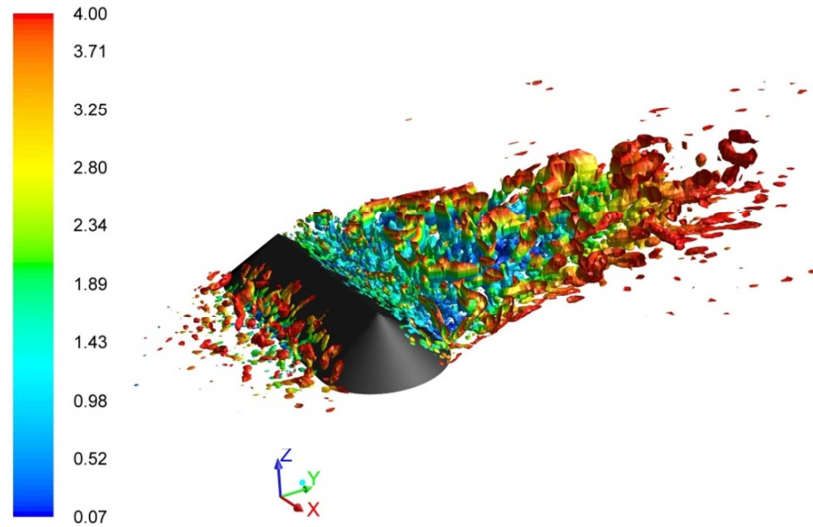


Figura 5.6 – Representação dos vórtices ao redor de uma pilha de estocagem pelo *Q-criterion*.

Outro parâmetro importante é o Número de *Courant* (Co), definido como uma medida local do domínio fluido que representa o fluxo numérico advectivo adimensionalizado para malha espacial e temporal. Para simulações com massa específica constante, Co , é definido por meio da Eq. 5-5 (MARCOLOVATTO, 2012):

$$Co = \frac{|u|\Delta t}{\Delta x} \quad \text{Eq. 5-5}$$

sendo $|u|$ a norma da magnitude da velocidade local (m/s), Δt o passo de tempo (s) e Δx o tamanho local dos volumes finitos da malha. Assim, Co tem a seguinte interpretação:

$$Co = \frac{\text{distância percorrida por uma onda de perturbação em um passo de tempo}}{\text{tamanho local dos volumes da malha}}$$

Nas simulações deste trabalho o valor variou entre 0,07 e 3. Esse valor foi verificado em alguns passos de tempo após ser observado que o escoamento estava desenvolvido (após simulações com o modelo de turbulência $\kappa\text{-}\omega$ e 90 segundos de tempo de execução e passo de tempo 10^{-3} s no modelo de turbulência LES).

Os avanços teóricos obtidos com os resultados apresentados foram a observação do escoamento turbulento ao redor de pilha de estocagem. Trabalhos anteriores haviam resolvido esses escoamentos com modelos estacionários, entre eles o modelo $k\text{-}\omega$ SST (TURPIN, 2010). O escoamento pode ser validado com experimentos em túnel de vento através da técnica a laser PIV, realizados por (TURPIN, 2010). Nesse caso, foram colocados seis monitores ao redor da pilha, nas posições indicadas na Figura 5.7, representando perfis verticais e horizontais de velocidade média (estatísticas temporais) nas proximidades da pilha orientada perpendicularmente à direção do escoamento.

A Figura 5.7 localiza os quatro perfis verticais e dois horizontais de velocidade média na direção do escoamento (estatísticas temporais), coletadas em torno da pilha. Os perfis verticais são numerados de 1 a 4 e os horizontais são os de número 5 e 6. A Tabela 5-1 apresenta as posições adimensionais dos perfis verticais em relação à origem das coordenadas nas três direções ($h=0,08$ m). Apenas ressaltando que o centro do domínio está na superfície (solo), no centro da pilha. No sentido de localizar o centro do domínio na Figura 5.1, ele está a 0,08 m abaixo (na direção vertical z) do ponto de início do perfil nº 2. A altura h de referência é a altura da pilha (0,08 m) e a velocidade do vento na superfície livre é de 6,5 m/s.

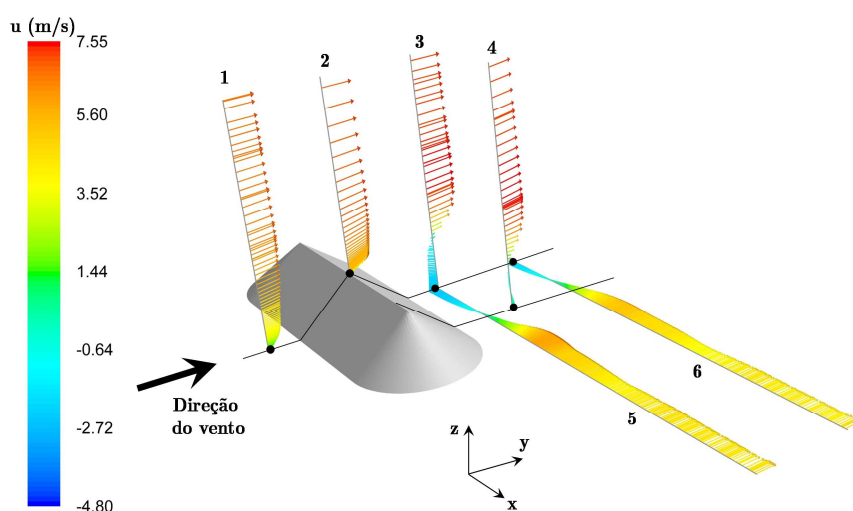


Figura 5.7 – Localização dos perfis verticais e horizontais de velocidade em escoamento perpendicular à pilha.

Tabela 5-1 – Posições dos perfis de velocidade verticais (1 a 4) e horizontais (5 e 6). Os valores indicam a posição adimensional dos perfis em relação à superfície onde se encontra o centro da pilha ($h=0,08$ m).

Número do perfil	x/h	y/h	z/h
1	0	-1,93	0
2	0	0	1
3	0	1,93	0
4	1,8	2,56	0
5	0	1,93	0,063
6	0	3,85	0,063

As comparações dos diferentes perfis de velocidade numéricos e experimentais em torno de uma pilha isolada são mostradas da Figura 5.8 a Figura 5.13. A abcissa representa a altura adimensional (sendo $h=0,08$ m a altura da pilha) e a ordenada é a velocidade média adimensional ($u_0=6,5$ m/s é a velocidade na superfície livre para a simulação, e 5,9 m/s para o experimento). Pode-se afirmar que os resultados reproduzem de maneira satisfatória os dados experimentais de velocidade ao redor da pilha. Com efeito, as variações relativas médias (erro relativo – E_{rel}) entre as velocidades experimentais (u_{exp}) e numéricas (u_{num}) são inferiores a 6%

em média. Esses percentuais são calculados em relação ao intervalo das medidas de velocidade média (u) para os diferentes perfis estudados, conforme Eq. 5-6 (TURPIN, 2010):

$$E_{rel} = \frac{\sum_{i=1}^n |u_{exp} - u_{num}|}{n * [max(u) - min(u)]} \quad \text{Eq. 5-6}$$

sendo $max(u)$ e $min(u)$, o maior e menor valor entre os perfis numérico e experimental, respectivamente, e n , a quantidade de pontos.

O perfil vertical nº 1 (Figura 5.8), localizado na entrada do domínio, está praticamente sobreposto ao perfil experimental, mostrando que as condições de entrada experimentais foram bem representadas numericamente. A montante da pilha, a variação média entre a velocidade experimental e numérica foi de aproximadamente 3,7%.

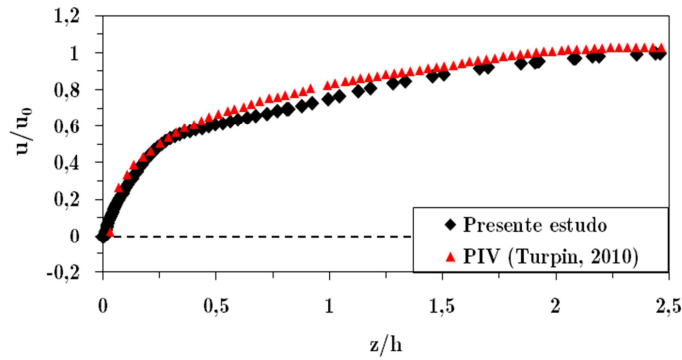


Figura 5.8 – Perfil nº 1: velocidade média vertical na coordenada $(x, y, z)=(0, -0,154, 0)$. Erro relativo: 3,7%.

O perfil nº 2 (Figura 5.9) está localizado no centro do topo da pilha. Observam-se uma forte aceleração no topo da pilha em um intervalo muito pequeno de altura ($z/h = 1$), passando a uma aceleração mais moderada a partir de ($z/h = 1,1$). Boa concordância foi obtida. Com relação às variações médias entre a simulação e o experimento com PIV foram de aproximadamente 7%. Apesar dos gráficos dos perfis nº 1 e 2 estarem semelhantes, há uma maior quantidade de pontos coincidentes no perfil nº 1 até a altura de $z/h = 1$, justifica a diferença entre os erros relativos.

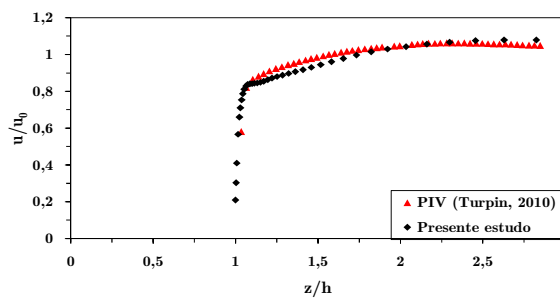


Figura 5.9 – Perfil nº 2: velocidade média vertical na coordenada $(x, y, z)=(0, 0, 0,08)$. Erro relativo: 7%.

Pode-se concluir que os perfis nº 1 e 2, localizados na parte anterior e topo da pilha, apresentaram boa concordância com relação à aceleração do fluido (perfil nº 1) e aceleração no topo da pilha (perfil nº 2). No entanto, a simulação numérica teve pequena dificuldade em representar adequadamente o perfil médio vertical de velocidade na faixa central dos perfis.

A Figura 5.10 apresenta o perfil vertical nº 3 no início da esteira turbulenta. Pode-se observar a simulação da zona de recolamento e as modificações ocorridas no perfil vertical de velocidade média em relação ao perfil representado à entrada do domínio. Alguns pontos negativos são representados, indicando uma zona de recirculação que inicia na superfície e vai até 0,10 m (pouco acima da altura da pilha, que é de 0,08 m), no ponto de passagem da velocidade negativa para positiva. Também nesse perfil há boa concordância na representação das zonas de recirculação e recolamento e acompanhamento de modo similar à curva representada pelo experimento. Os erros relativos foram da ordem de 3%.

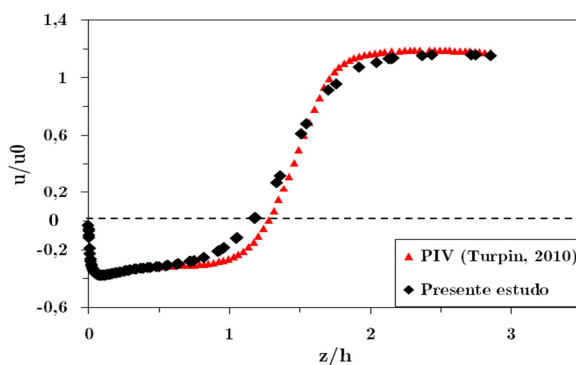


Figura 5.10 – Perfil nº 3: velocidade média vertical na coordenada $(x, y, z)=(0, 0,154, 0)$. Erro relativo: 3%.

Similar à Figura 5.10, o perfil vertical nº 4 apresentado na Figura 5.11 representa a esteira turbulenta a jusante da pilha. Esse perfil está deslocado de 0,144 m em relação ao eixo y e apresenta pontos de recirculação, mas com a passagem da velocidade negativa para positiva pouco abaixo da altura da pilha (aproximadamente 0,07 m). Vale ressaltar que esse perfil foi o que mais apresentou erro relativo (em torno de 8%), devido ao modelo de turbulência ter apresentado maior aceleração do fluido após a altura da pilha, apesar de acompanhar o formato da curva do experimento.

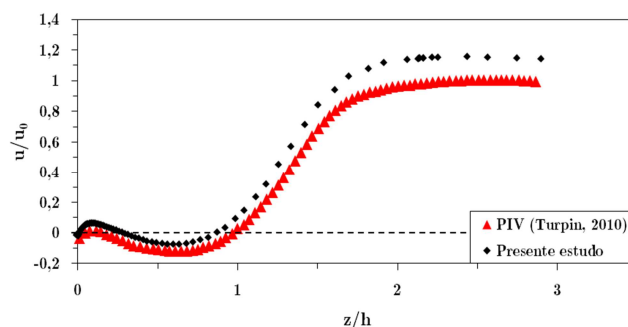


Figura 5.11 – Perfil n° 4: velocidade média vertical na coordenada $(x, y, z)=(0,144, 0,205, 0)$. Erro relativo: 8%.

O perfil n° 5 (Figura 5.12) trata a velocidade média horizontal, localizado a 0,005 m da superfície e a 0,154 m após o centro da pilha e mostra boas concordâncias na reprodução da curva do experimento. Percebem-se boas concordâncias na distância horizontal relativo a até 2 vezes a altura da pilha, com um ligeiro aumento da aceleração após essa distância. Há uma inversão do perfil de negativo para positivo na zona da esteira turbulenta, na área fronteira entre o local em que há influência da pilha e o escoamento livre. O erro relativo foi da ordem de 4,7%.

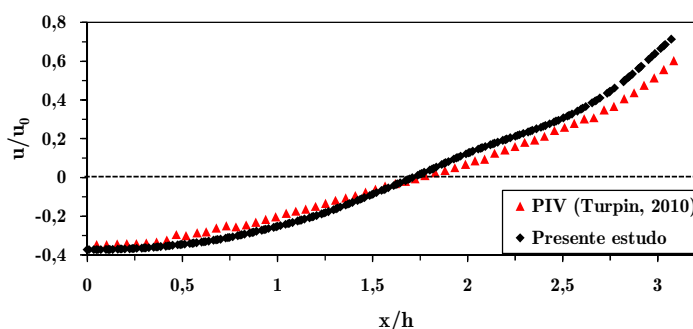


Figura 5.12 – Perfil n° 5: velocidade média horizontal na coordenada $(x, y, z)=(0, 0,154, 0,005)$. Erro relativo: 4,7%.

Outro perfil de velocidade média horizontal (n° 6) é mostrado na Figura 5.13. Comparando os perfis horizontais n° 5 e 6, observa-se que o ponto de inversão da velocidade negativa para positiva está mais próximo do centro do domínio, próximo a $1,5h$, enquanto o perfil horizontal n° 5 esse ponto ocorreu um pouco mais afastado do centro do domínio, demonstrando, nesse perfil, uma menor influência da esteira turbulenta. Muito boas concordâncias foram obtidas no perfil n° 6. O erro relativo foi de 3,3%.

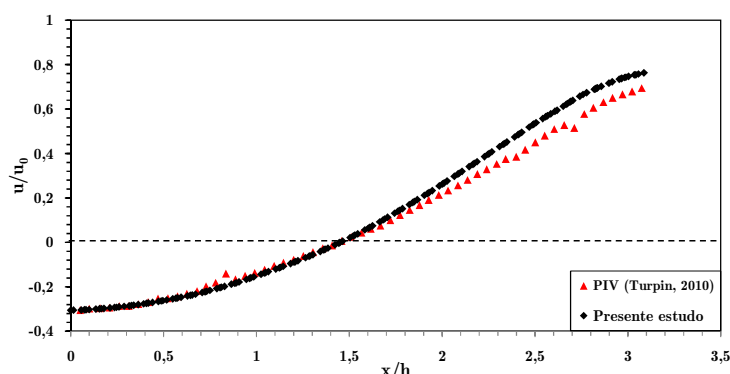


Figura 5.13 – Perfil nº 6: velocidade média horizontal na coordenada $(x, y, z) = (0, 0,308, 0005)$. Erro relativo: 3,3%.

De um modo geral os perfis horizontais e verticais de velocidade média apresentaram boas concordâncias, com ótimas concordâncias quando observados próximo à superfície. As maiores diferenças das velocidades médias nos perfis da simulação numérica em relação aos experimentos ocorreram próximo ao centro dos perfis. O erro médio relativo considerando todos os perfis foi de aproximadamente 4,7%, considerados resultados interessantes e válidos para representar os experimentos (TURPIN, 2010).

A Figura 5.14 representa a vista superior do escoamento, colorido de acordo com os valores de velocidade média sobre a superfície de uma pilha isolada perpendicular à direção do escoamento, obtido por simulações numéricas. Destacam-se as zonas de alta velocidade e de separação da pilha. Resultados semelhantes foram observados em Turpin (2010).

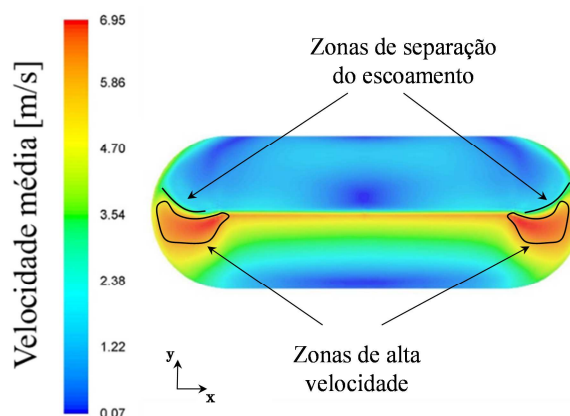


Figura 5.14 – Vista superior do escoamento, colorido por valores de velocidade sobre a superfície de uma pilha isolada perpendicular à direção do escoamento.

Na Figura 5.15 tem-se o perfil de cisalhamento médio na superfície da pilha, de onde se observa na área marcada a localização das maiores velocidades. Esse perfil vai de encontro ao que foi mostrado nos perfis verticais da Figura 5.9, onde há uma grande aceleração no topo da pilha na direção do escoamento.

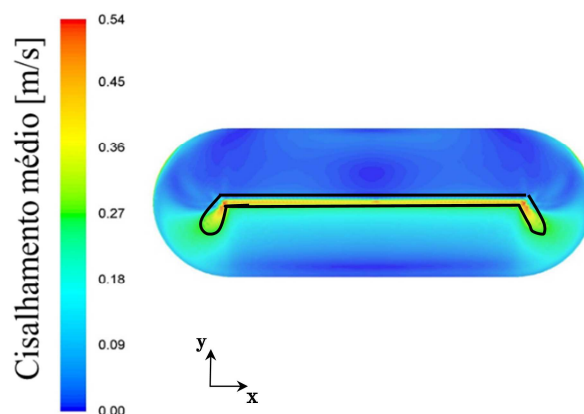


Figura 5.15 – Vista superior do escoamento, colorido por valores de velocidade de cisalhamento média sobre a superfície de uma pilha isolada perpendicular à direção do escoamento.

A Figura 5.16 representa um plano vertical passando no centro do domínio na direção do escoamento, com o perfil de velocidade média do escoamento. Em destaque as zonas de maior velocidade média (região número 1), devido à aceleração do fluido quando se desprende da pilha na região do topo, característica que já tinha sido detectada no perfil vertical nº 2 (Figura 5.9). Vale ressaltar que as comparações são apenas do comportamento do fluido, pois o perfil da Figura 5.9 utiliza a velocidade média na direção do escoamento.

Também é mostrada uma estrutura de vórtice dominante. Esta estrutura induz uma zona de baixa velocidade, conforme indicados pelos contornos de velocidade média. Vê-se após a região nº 2 na direção do escoamento a retomada (aumento) da velocidade até que não haja mais influência da pilha no escoamento.

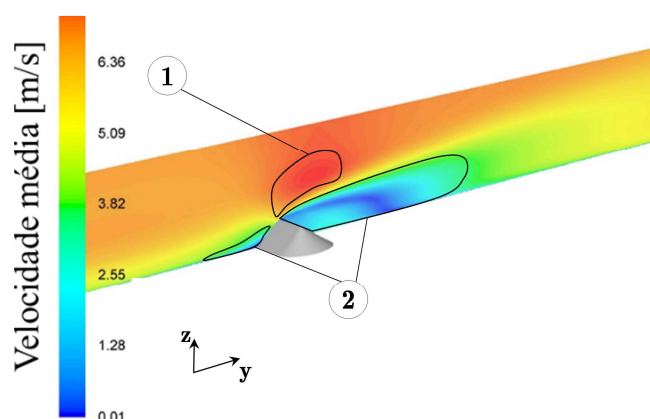


Figura 5.16 – Vista de frente a um plano colorido por valores de velocidade média. O plano passa no centro do domínio na direção do escoamento.

A Figura 5.17 mostra a vista superior do escoamento, coloridos pela velocidade instantânea. Nesse caso, observa-se na demarcação da área nº 1 a montante da pilha iso-superfícies de maior velocidade instantânea. Essa área corrobora com os perfis já comentados nos resultados, indicando que há um alto gradiente de velocidade.

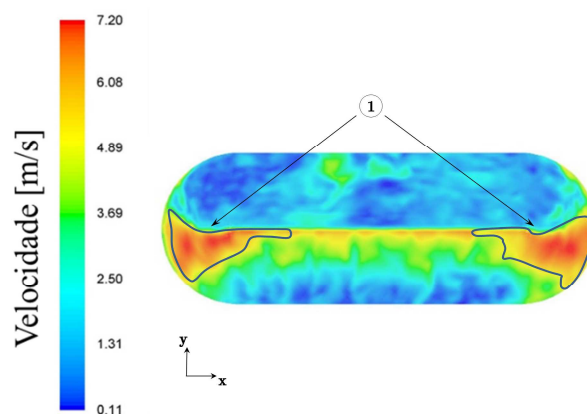


Figura 5.17 – Vista superior do escoamento, colorido por valores de velocidade instantânea na superfície da pilha.

A Figura 5.18 complementa o perfil de velocidade instantânea, ao demonstrar nas mesmas áreas mostradas na Figura 5.17 a relação entre o aumento da velocidade instantânea e a correspondente velocidade de fricção instantânea. Também é importante observar as velocidades instantâneas próximas de zero no lado da pilha oposto à incidência do vento para ambas as figuras.

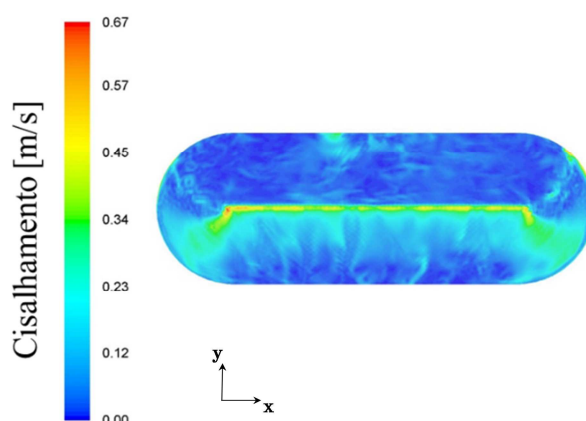


Figura 5.18 – Vista superior do escoamento, colorido por valores de velocidade de fricção instantânea na superfície do escoamento.

A Figura 5.19 representa um plano no centro do domínio, colorido pela flutuação de velocidade. Convém observar os limites inferiores e superiores da flutuação, tendo como limite inferior 0,01 m/s e superior 2,15 m/s. Os limites inferiores são mostrados nas áreas onde não há nenhuma influência da presença da pilha.

Os limites superiores aparecem na posição do plano no centro da esteira turbulenta, reforçando a influência da pilha nos valores de flutuação de velocidade por praticamente todo o domínio após a presença do obstáculo, com maior influência nas posições mais próximas da pilha a jusante da mesma, e diminuindo quando se afasta da pilha.

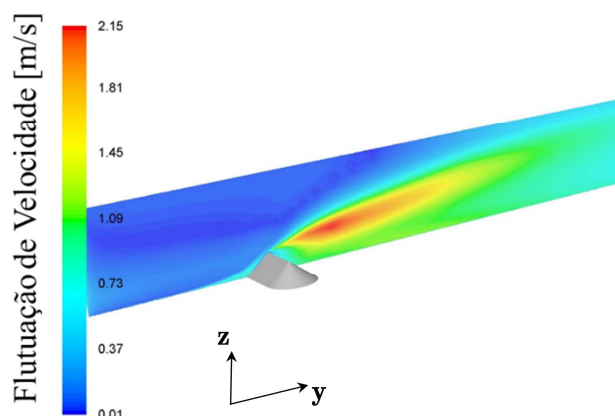


Figura 5.19 – Vista frontal colorida por valores de flutuação de velocidade na direção do escoamento.

A Figura 5.20 apresenta a velocidade média adimensional na direção do escoamento, sendo $U_0=6,5$ m/s. É possível perceber uma região de velocidade negativa a jusante da pilha, representando nessa região a zona de recirculação. Dada a inclinação de 38° da pilha, também é possível ver que há uma aceleração do fluido na região acima da pilha, provocada pelo fato da pilha se comportar como obstáculo ao escoamento, fazendo com que haja uma retração inicial da velocidade instantânea na zona a montante, sendo acelerada paulatinamente à medida que o escoamento se aproxima do topo da pilha, chegando ao ápice da aceleração na região acima da altura da pilha, na região onde mais próximo do solo se encontra a zona de recirculação e na parte superior a zona de velocidade maior que a velocidade de referência.

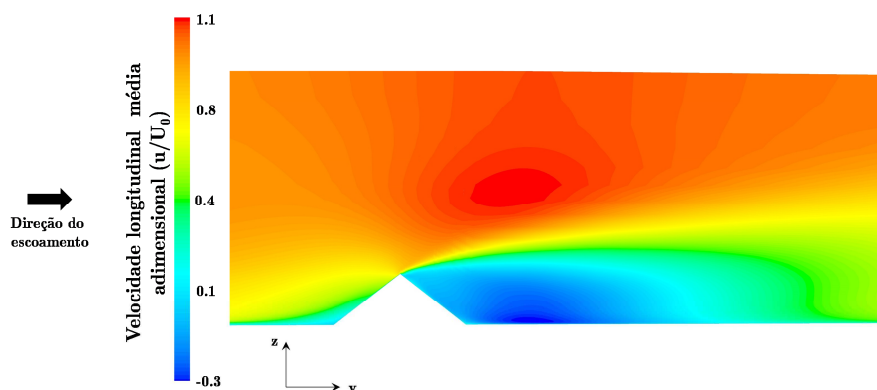


Figura 5.20 – Vista frontal colorida por valores de velocidade média adimensional na direção do escoamento no plano na coordenada $x=0$.

Com o objetivo de comparar o ponto de recolamento na simulação numérica em relação ao experimento, a Figura 5.21 mostra um perfil de velocidade média na direção do escoamento tomado bem próximo à superfície, nas coordenadas, em metros, $(x, y, z)=(0, y, 1,25 \times 10^{-3})$, onde y é a direção do escoamento. Também está representada na Figura 5.21 a posição da pilha em relação ao perfil traçado. Observa-se nesse perfil o comportamento do escoamento,

com velocidades negativas após a pilha até a posição $(x, y, z) = (0, -0,197, 1,25 \times 10^{-3})$, indicando o fim da zona de circulação.

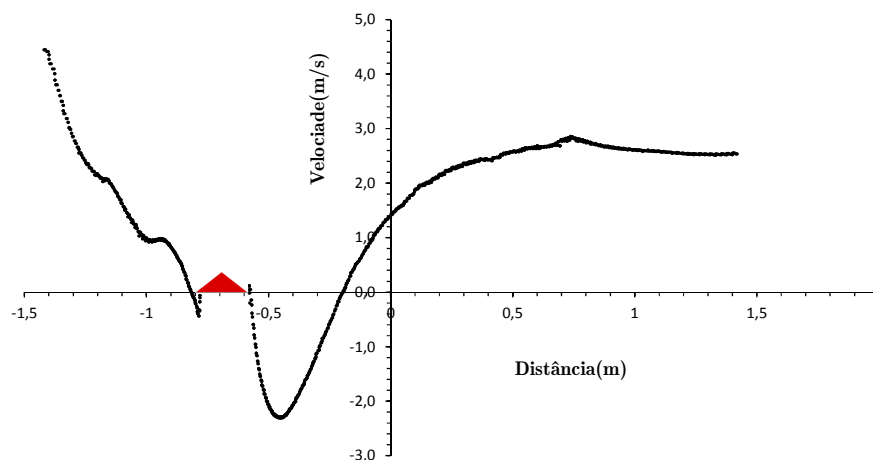


Figura 5.21 – Perfil de velocidade média na direção do escoamento, tomado nas coordenadas $(x,y,z)=(0,y,1,25 \times 10^{-3})$, em metros. A pilha (triângulo) tem altura de 0,08 m e largura de 0,205 m.

Na Figura 5.22 tem-se a representação do detalhe mais aproximado do ponto de recolamento, em que a abcissa é a direção do escoamento (m) e a ordenada é a velocidade média na direção do escoamento (m/s).

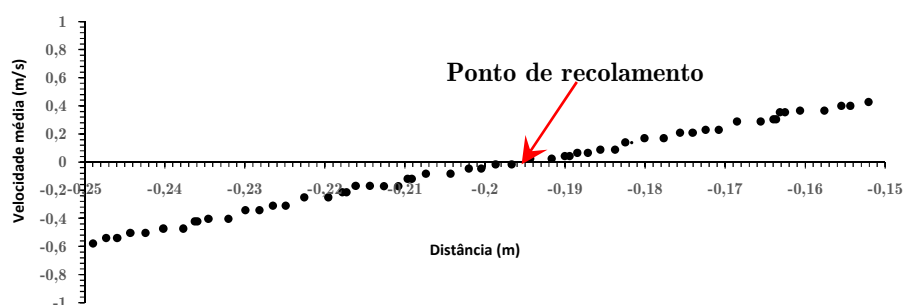


Figura 5.22 – Perfil de velocidade média na direção do escoamento, tomado nas coordenadas $(x,y,z)=(0,y,1,25 \times 10^{-3})$, em metros, detalhando o ponto de recolamento na coordenada $(x, y, z) = (0, -1,97, 1,25 \times 10^{-3})$.

A Figura 5.23 e Figura 5.24 comparam por meio dos vetores de velocidade média ao longo da direção do escoamento as zonas de recirculação no plano transversal, geradas em experimento PIV e simulação numérica, respectivamente. Pode-se observar que o escoamento em torno de uma pilha isolada é acelerado até a inclinação a montante, em seguida, separado a partir da superfície, no topo da pilha. O fluido acelerado passa por cima da pilha. A jusante desta pilha é criada uma zona de recirculação caracterizada por velocidades negativas na direção do escoamento (u , em m/s).

Para comparar a Figura 5.23 e Figura 5.24, a distância do centro da pilha até o ponto de recolamento foi adimensionalizada, sendo h a altura da pilha e L a distância, em unidades h ,

do centro da pilha até o ponto de recolamento. Assim, para a simulação numérica, a distância da origem dos eixos coordenados até o centro da pilha (tomando-se como referência o plano médio em $x=0$) é de 0,68 m, que subtraído da distância de 0,197 m (primeiro valor de velocidade positiva no perfil mostrado na Figura 5.22), resulta no valor de 0,483 m. Esse resultado é então dividido pela altura da pilha, tendo como novo resultado a distância do centro da pilha até o ponto de recolamento, que é de $6,0375 h$. Observa-se, assim, que a simulação numérica representou com ótimas concordâncias a zona de recirculação e o ponto de recolamento, uma vez que o erro foi de apenas 1,5%, dado que o experimento em PIV resultou na distância de $5,95 h$, representada pela Figura 5.23.

Pode-se observar ainda na Figura 5.24 as regiões de escoamento já observadas em Furieri (2012) e Turpin (2010), como a região de incidência (1), zona de separação (2), de recirculação (3), caracterizada por velocidades médias negativas na direção do escoamento e ponto de recolamento.

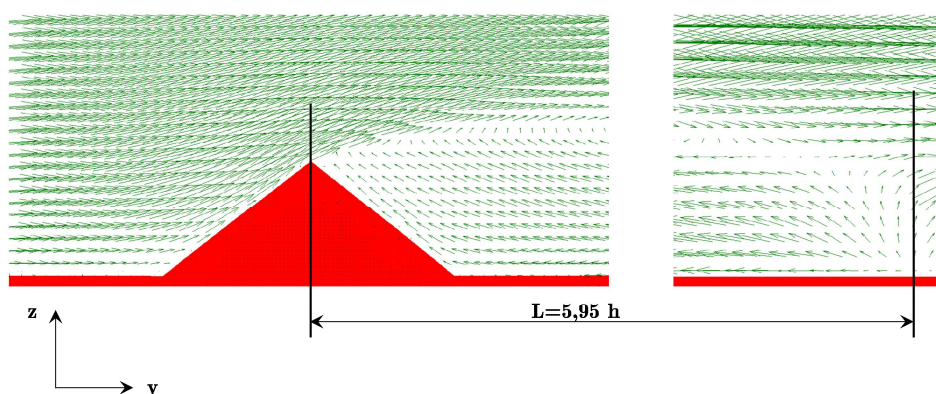


Figura 5.23 – Vetor de velocidade obtidos para $u_0 = 6,5$ m/s e escoamento incidente a 90° para uma pilha em experimento com PIV no plano médio do domínio.

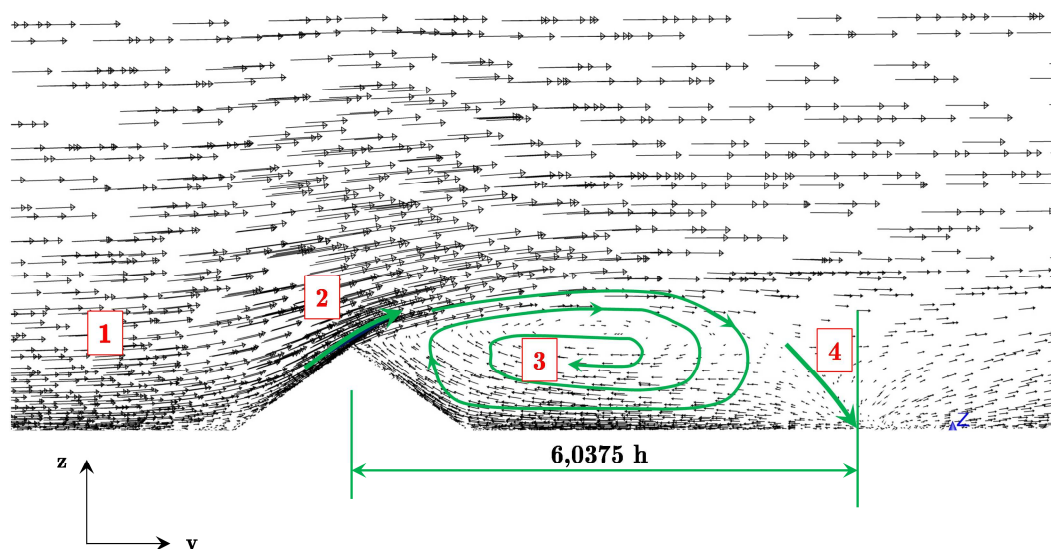


Figura 5.24 – Vetor de velocidade obtidos para $u_0 = 6,5$ m/s e escoamento incidente a 90° por simulação numérica para uma pilha no plano médio do domínio.

5.3 Dispersão de partículas emitidas da pilha de estocagem por erosão eólica

O objetivo dessa seção é analisar, sob o aspecto da dispersão, o comportamento das partículas após injeção das mesmas da superfície da pilha. As avaliações das partículas erodidas da pilha são feitas em função da área (S) após a pilha, na direção do escoamento, sendo $S = 1,5 \text{ m} \times 1,9225 \text{ m}$ e do volume (V) ocupado acima da área S , sendo $V = 1,5 \text{ m} \times 1,9225 \text{ m} \times 0,40 \text{ m}$.

Nesse sentido, partículas com 5 tamanhos diferentes variando de $100 \mu\text{m}$ a $194 \mu\text{m}$ são injetadas com velocidade nula na superfície da pilha. A taxa de emissão das partículas é variável de acordo com as iso-superfícies de velocidade de fricção da pilha. Todos os cálculos e procedimentos de injeção foram explicados na metodologia, Seção 4.2. A Figura 5.26 representa o domínio da simulação.

Basicamente, as hipóteses relacionadas à injeção de partículas no domínio são as seguintes: lançamento de partículas com velocidade inicial nula, distribuição desigual do fluxo de massa emitido dependente da velocidade de fricção próxima à parede da pilha e decaimento temporal do fluxo de massa emitida devido à influência da presença de partículas não erodíveis. A Figura 5.25 apresenta iso-superfícies de velocidade de fricção normalizada próxima à parede da pilha. A variação do fluxo de massa emitido ocorre devido à diferença de velocidade percebida nessas iso-superfícies. A zona mais próxima do solo (u_s/u_r em torno de 0,30) representa o limite a partir do qual existe emissão e, portanto, foi calculado um fluxo de massa emitida. O contorno das laterais da pilha (u_s/u_r em torno de 1,10) representa o valor

máximo de fluxo de massa emitido. Nesse sentido, há um fluxo mais elevado nas laterais da pilha, região de mais forte erosão.

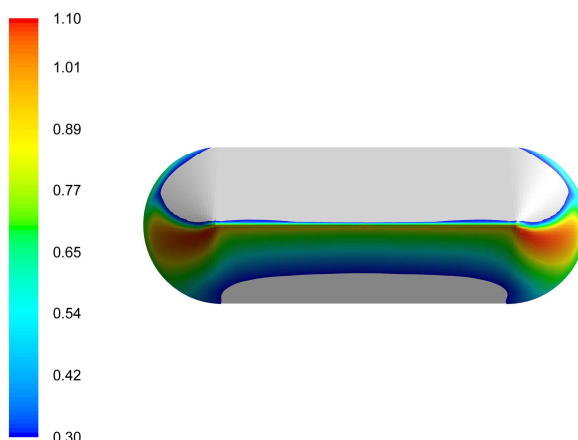


Figura 5.25 – Iso-superfícies de velocidade normalizada próximas à parede da pilha.

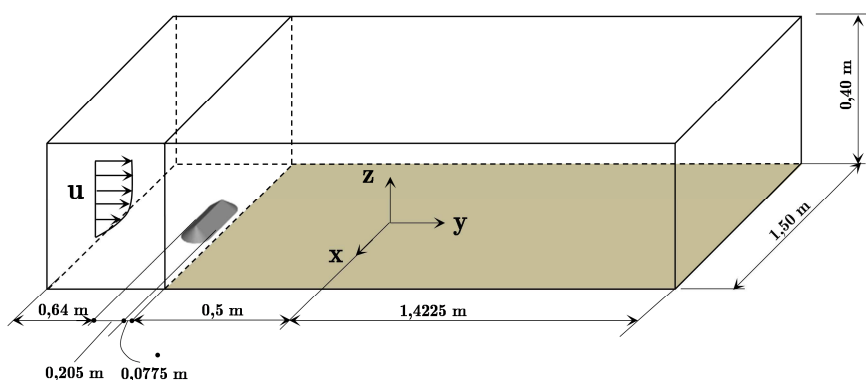


Figura 5.26 – Domínio de avaliação da emissão e dispersão de partículas da pilha.

Os resultados são armazenados em intervalos de 0,5 s, de modo a fornecer a variação da massa no entorno da pilha. Os principais dados referentes às parcelas utilizadas nos cálculos são (já explicadas na Seção 4.2.3): Identificador da parcela, massa da parcela, diâmetro da partícula e coordenadas da parcela. Com base nesses dados, são analisadas as massas das partículas e as suas relações com a suspensão, deposição e ressuspensão, conforme Figura 5.29, itens (a) a (i):

a) Massa das partículas presentes no domínio no instante t_1 e que permanecem no domínio no instante t_2 , ou seja, massa de partículas que foram emitidas neste intervalo – Esse cenário considera a massa das partículas existentes no domínio que estão suspensas, somadas às massas das partículas que estão depositadas na superfície. Após uma quantidade de massa emitida da pilha no instante inicial (em torno de 1 g), há um grande decréscimo, baixando para patamares em torno de 0,001 g, permanecendo nessa faixa de valores o restante da simulação.

b) Partículas depositadas no instante t_1 e no instante t_2 continuam depositadas dentro do domínio – A massa depositada inicial está em torno de 1×10^{-4} g, havendo uma diminuição no restante da simulação para 5×10^{-7} g. Assim, observa-se que uma pequena quantidade de massa permanece no domínio na simulação.

c) Partículas que no instante t_1 estão suspensas e no instante t_2 continuam suspensas dentro do domínio – Após a rajada inicial devido a emissão das iso-superfícies da pilha, cuja massa é de 1 g, há uma queda da massa na simulação para 1×10^{-3} g. É interessante observar a semelhança entre as partículas suspensas e depositadas entre dois instantes da simulação, com mudança da ordem de grandeza dos valores.

d) Partículas que no instante t_1 estão depositadas e no instante t_2 estão suspensas dentro do domínio (ressuspensão). A massa ressuspensa é toda a massa das partículas que se depositaram no domínio no tempo t_1 e que, após o escoamento voltam a suspender. Numa análise do gráfico pode-se perceber desde o instante inicial que a massa de partículas ressuspensas está muito próxima dentro do intervalo simulado, variando em torno de 2×10^{-5} g.

O termo ressuspensão tem sido utilizado para indicar o reentrando na atmosfera, de material que estava previamente depositado. O termo suspensão ou entranhamento é utilizado quando o material não estava previamente depositado por escoamentos atmosféricos. A ressuspensão tem sido expressa como fator de ressuspensão ou taxa de ressuspensão.

Fator de ressuspensão (FR) (m^{-1})

O fator de ressuspensão (FR) é definido como:

$$FR = \frac{C}{S} \quad \text{Eq. 5-7}$$

sendo C - concentração de partículas suspensas no ar, em $\mu g/m^3$; S – concentração na superfície, em $\mu g/m^2$.

A concentração das partículas no ar é medida em alguma altura de referência acima do nível do solo. O FR tem sido criticado devido à falha em não levar em consideração a ressuspensão na direção do escoamento e material levado para a zona de medição. Um valor adequado do FR depende da velocidade de deposição do material ressuspenso. Também no uso do FR assume-se que a concentração do material no ar é totalmente derivada da superfície.

A inclusão da concentração das partículas suspensas no ar na Eq. 5-7 introduz duas complicações na determinação da ressuspensão, igualmente se a advecção é desconsiderada. Primeiro, a concentração atmosférica dependerá da taxa de diluição do material ressuspenso e,

consequentemente, o FR é uma função da velocidade do vento, independentemente se houver uma mudança da quantidade ressuspensa na unidade de tempo. Segundo, a concentração das partículas suspensas no ar utilizada para calcular FR deveria ser uma representação adequada da ressuspensão. No entanto, para partículas de tamanhos maiores, as quais depositam no solo e se move em movimentos de saltos, a altura da medida da concentração das partículas suspensas no ar é importante (NICHOLSON, 1988).

Taxa de ressuspensão (TR) (s^{-1})

Uma expressão alternativa ao Fator de Ressuspensão é a Taxa de Ressuspensão (TR), a qual é definida como a fração da espécie removida da superfície por unidade de tempo:

$$TR = \frac{R}{S}$$

sendo R – fluxo de massa ressuspensa, em $\mu g/m^2 s$; S – concentração na superfície, em $\mu g/m^2$.

Posto que foram definidos e explicados os parâmetros necessários para o cálculo da ressuspensão, a Figura 5.27 representa o comportamento do Fator de Ressuspensão em função do tempo, definido como a relação entre a concentração de partículas suspensas, em $\mu g/m^3$ e as partículas depositadas na superfície, em $\mu g/m^2$. Assim, a unidade do Fator de Ressuspensão é m^{-1} . O gráfico apresentado na Figura 5.27 elaborado considerando as concentrações instantâneas das partículas em suspensão em relação à concentração das partículas depositadas. Inicialmente há um alto Fator de Ressuspensão de aproximadamente $1000 m^{-1}$, passando a níveis entre 300 a $400 m^{-1}$ no tempo medido restante. Jensen (1984) comenta que os parâmetros de cálculo da ressuspensão podem ou não ser constantes, de acordo com a velocidade do vento e se há quantidade de partículas suficientes para ser ressuspensas de superfícies de modo a manter um fluxo constante. No presente trabalho, além da área em que a concentração na superfície aparece no cálculo do Fator de Ressuspensão, há uma geração de partículas que participam da dinâmica do escoamento a jusante da pilha.

Os valores reproduzidos na Figura 5.27 estão muito maiores do que trabalhos que utilizam o Fator de Ressuspensão, como em Lengweiller (2000), cuja ordem de grandeza foi de no máximo de 10^{-4} . No entanto, justifica-se pelo fato do trabalho de Lengweiller (2000) utilizar velocidades muito menores (no máximo 1,5 m/s), além do experimento ter sido em ambientes internos (simulação de cômodos de uma casa), e, finalmente, não haver renovação das partículas ressuspensas. A comparação com esse trabalho foi no intuito apenas de dar uma

ideia da ordem de grandeza desse parâmetro. Nesse sentido, pode-se entender o porquê do alto Fator de Ressuspensão: As partículas são renovadas pela emissão contínua da pilha no intervalo demonstrado na Figura 5.27, a velocidade na superfície livre de 6,5 m/s, gerando considerável zona de recirculação e esteira turbulenta.

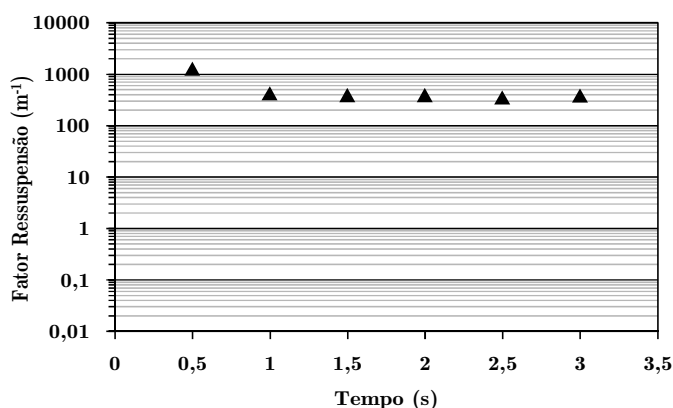


Figura 5.27 – Fator de ressuspensão em função do tempo.

Um parâmetro alternativo para o fator de ressuspensão é a taxa de ressuspensão, definida como a relação entre taxa de remoção das partículas da superfície, em $\mu g m^{-2} s^{-1}$ pela concentração de partícula na superfície, $\mu g m^{-2}$. A Figura 5.28 representa a taxa de ressuspensão instantânea em função do tempo. Diferente do fator de ressuspensão, a taxa de ressuspensão é em unidades de s^{-1} . Observa-se, nesse caso, que inicialmente há pouca ressuspensão ($0,07 s^{-1}$) no início do processo de emissão da pilha, e, partir daí, passa a ter valores entre 30 a $40 s^{-1}$ nos tempos medidos. Isso se justifica devido ao fato da quantidade de partículas depositadas nos primeiros intervalos de tempo ter sido pequena, até que, após alguns instantes de tempo, houve uma deposição que justificou a maior ressuspensão devido aos movimentos turbulentos.

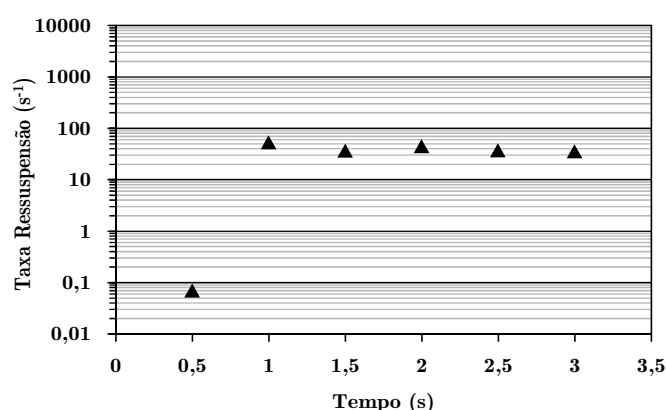


Figura 5.28 – Taxa de ressuspensão em função do tempo.

- e) Partículas que no instante t_1 estão depositadas e no instante t_2 estão fora do domínio – Após a rajada inicial, há uma quantidade de partículas saindo do domínio, variando entre 2×10^{-2} g e 2×10^{-3} g em 80% da simulação.
- f) Partículas que no instante t_1 estão suspensas e no instante t_2 estão fora do domínio – Observa-se que uma semelhança entre os gráficos de suspensão e deposição, em relação às partículas que saíram do domínio.
- g) Partículas que estavam suspensas em t_1 e estão depositadas em t_2 – Após a emissão inicial das iso-superfícies, há uma massa depositada (e que estava suspensa) de 5×10^{-3} g. Em seguida há um decaimento, com uma massa depositada constante em torno de 1×10^{-5} g.
- h) Partículas que não estão presentes no domínio em t_1 e estão depositadas em t_2 (novas deposições) – Observa-se que após o instante inicial há uma maior massa depositada de partículas que não estavam presentes no domínio no instante t_1 (5×10^{-3} g), enquanto no restante da simulação teve uma queda, permanecendo constante em 1×10^{-5} g.
- i) Partículas que não estão presentes no domínio no instante t_1 e estão suspensas no instante t_2 (novas suspensões) – Observa-se que entre 5 pontos dos 6 listados concordam em uma massa de partículas em faixas bem próximas: entre 6×10^{-6} g e 1×10^{-5} g.

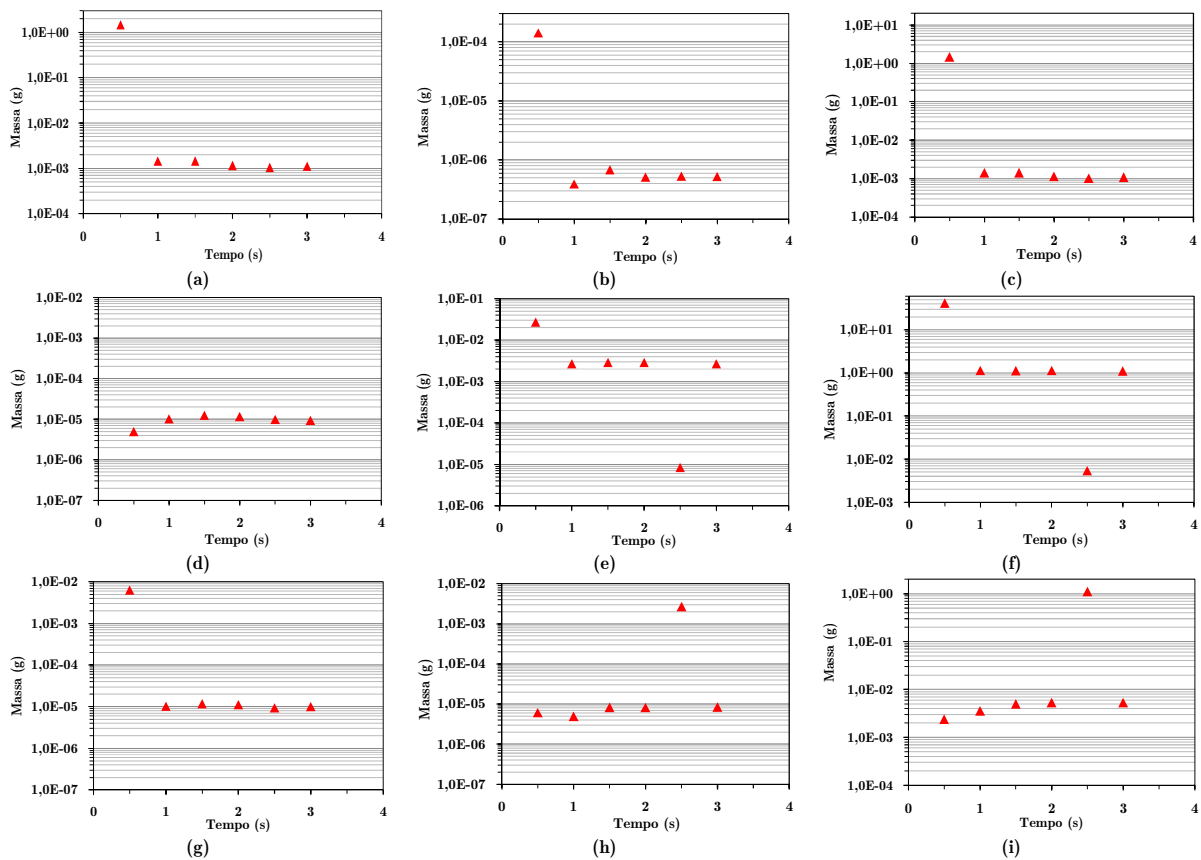


Figura 5.29 – Cenários de variação das massas entre os tempos de partículas dentro do domínio entre (a) e (i) são apresentados e discutidos no texto.

A Figura 5.30 relaciona as massas suspensas e depositadas ao longo do tempo. Pode-se observar a maior massa de partículas suspensas em relação à depositada, fato que pode ser explicado pelo ângulo de 38° da pilha, que gera uma aceleração do fluido a jusante, causando uma área de recirculação e de influência da pilha dentro do domínio, conforme já mostrado na Figura 5.24. Essa influência é exercida em grande parte do volume de fluido a jusante da pilha. Vale ressaltar também como fator a alta velocidade incidente de 6,5 m/s. Apesar do decaimento temporal da quantidade de partículas emitidas da pilha, este decaimento é praticamente imperceptível pelo tempo de simulação utilizado, tornando a emissão muito próxima de um valor constante. Essa continuidade na emissão leva a grandes valores de suspensão e deposição, com uma taxa de renovação em relação às partículas que saíram do domínio de simulação.

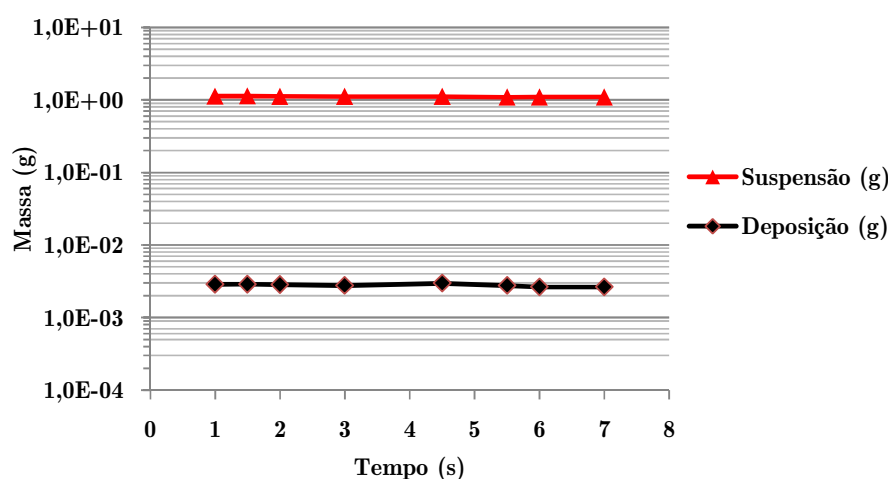


Figura 5.30 – Relação entre suspensão e deposição instantânea.

A Figura 5.31 apresenta o esquema em que as concentrações instantâneas são analisadas no espaço ao longo do domínio a jusante da pilha. Para isso, inicialmente foram traçados 10 paralelepípedos com mesmas dimensões em metros $(x, y, z) = (1,5 \times 0,01 \times 0,4)$, espaçados em intervalos de 0,2 m, com o primeiro paralelepípedo posicionado a 0,0775 m a jusante da pilha na direção y (aproximadamente a altura da pilha). Todos os paralelepípedos foram divididos em paralelepípedos menores, de dimensões, em metros, $(x, y, z) = (1,5 \times 0,01 \times 0,004)$, o que equivale a ter, em cada paralelepípedo maior, 100 paralelepípedos menores. O tempo de execução em que as concentrações instantâneas foram avaliadas foi de 3 segundos após o início da injeção de partículas no domínio.

Em seguida, uma vez que se têm as coordenadas das parcelas de partículas dentro do domínio de análise, são calculadas as concentrações das parcelas dentro dos paralelepípedos, dividindo-se as massas das parcelas pelo volume do paralelepípedo. Nesse caso, a

concentração será representada no centro de cada paralelepípedo. Vale ressaltar que a simulação numérica utiliza cinco tamanhos diferentes de partículas, entre 100 μm e 194 μm .

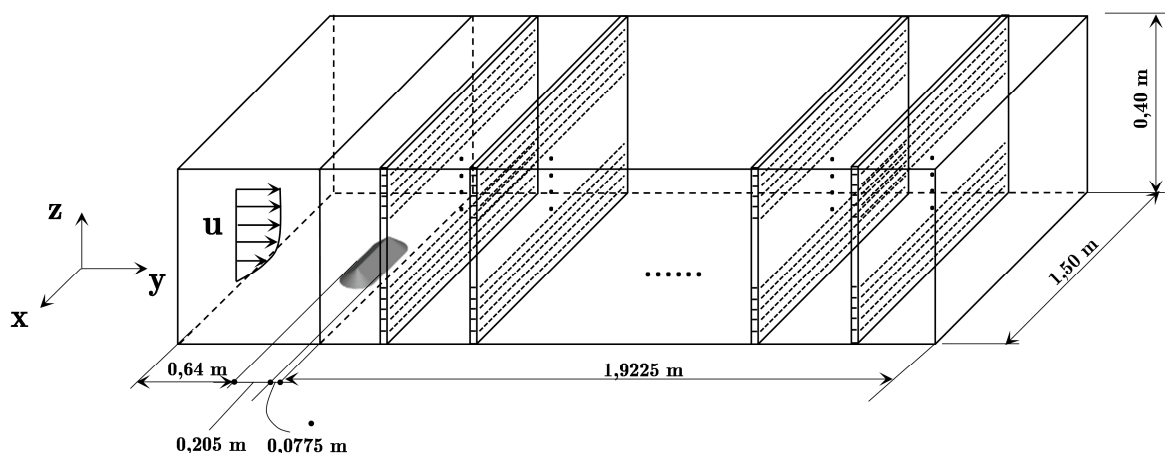


Figura 5.31 – Esquema de apresentação da concentração espacial instantânea.

Serão representados os seguintes parâmetros ao longo do domínio a jusante da pilha: *i*) concentração das partículas suspensas por tamanho das partículas; *ii*) concentração das partículas suspensas sem distinção de faixa granulométrica; *iii*) fator de ressuspensão (*FR*) e taxa de ressuspensão (*TR*), ambos sem distinção de tamanho de partículas.

A Figura 5.32 apresenta os resultados da concentração instantânea espacial (g/cm^3) em função da altura (cm) para as partículas de tamanho 100 μm , no tempo de execução de 1 segundo após o início da emissão pela pilha. Os valores listados nos itens de (a) até (j) referem-se às posições em relação ao centro do domínio, já representado na Figura 5.26 (esses itens são repetidos na Figura 5.33 e Figura 5.34). Observa-se uma mudança no perfil de concentração com o afastamento a jusante da pilha. A concentração próxima à superfície é da ordem de 10^{-3} a 10^{-4} g/cm^3 , similar aos trabalhos de Zhang, Wang e Lee (2007) para tamanhos de partículas similares.

Esses trabalhos também reportaram um rápido decrescimento em função da altura do domínio. Até a altura da pilha (linha tracejada na altura de 8 cm), há pouca diferença no perfil de concentração, com decaimento maior nos perfis mais próximos a jusante, e diminuição desse decaimento quando há um afastamento, indicando uma menor influência da pilha nos perfis de concentração e término da zona de recirculação, coincidindo com a estabilização da esteira turbulenta.

Quando observados após a altura da pilha, observa-se uma inversão do perfil de concentração, quando se termina uma tendência de diminuição e passa-se a um aumento da mesma acima da pilha. Esse comportamento pode ser explicado em conjunto com a Figura 5.21, quando o

perfil de velocidade média na direção do escoamento é retomado aos maiores patamares e há uma menor influência da pilha nesse perfil. Também é justificativa a hipótese de grande quantidade de partículas em movimento de saltos na região da zona de recirculação. Percebe-se também uma mudança no perfil de concentração no ponto de recolamento, que acontece entre os perfis mostrados próximos ao item (c) (1,25 h).

A Figura 5.33 apresenta os resultados da concentração espacial (g/cm^3) em função da altura (cm) para as partículas de tamanho $194 \mu\text{m}$. Também com esse tamanho de partícula há uma mudança no perfil de concentração com o afastamento a jusante da pilha. No entanto, percebe-se uma diferença entre os dois perfis de concentração no espaço (Figura 5.32 e Figura 5.33), com menor variação da concentração em função da altura do domínio. Com relação às diferenças dos perfis antes da altura da pilha, trabalhos de Zhang, Wang e Lee (2007) encontraram resultados com partículas de tamanhos semelhantes com justificativas de muitas partículas em movimento de saltos próximos à parede. Vale observar que a representação dos dados de concentração no espaço vão até 25 cm.

A Figura 5.34 mostra os perfis de concentração no espaço de todas as faixas granulométricas. As mudanças nos perfis são mais acentuadas devido à presença das partículas menores, e, ao comparar os perfis da Figura 5.34 com a Figura 5.32 e Figura 5.33, percebe-se a mudança na silhueta da curva, ou seja, a silhueta se torna mais acentuada com o aumento da variedade de tamanhos de partículas. Isso é compreensível, uma vez que há uma aceleração do fluido que envolve as partículas nas laterais e topo, aumentando a concentração imediatamente acima da altura da pilha (0,08 m).

Vale ressaltar que as isolinhas de concentração são formadas somente por partículas suspensas. A representação dos valores de concentração variaram entre $4,2 \times 10^{-5}$ e $1 \times 10^{-7} \text{ g}/\text{cm}^3$. Na Figura 5.34-(a) tem-se o perfil de concentração vertical mais próximo da pilha, na distância adimensional de $1 h$ (onde h é a altura da pilha). Veem-se concentrações próximas aos níveis máximos próximos do solo, e baixas concentrações pouco acima da altura da pilha. Esse perfil se justifica pela proximidade da zona de recirculação, sendo, nesse caso, locais de velocidades instantâneas negativas em confronto com o fluido em aceleração vindo do topo da pilha, conforme já observado na Figura 5.24. Assim, a região em estudo têm partículas em movimento de saltos mais próximo à superfície, em detrimento de partículas que estão erodindo das laterais da pilha (em maior quantidade) e do topo (em menor quantidade), uma vez que nessas regiões estão as maiores velocidades instantâneas do fluido.

Na Figura 5.34-(b), aumenta-se a distância para $3,5 h$, e agora se tem uma distância um pouco maior em relação à pilha, e um avanço para dentro da zona de recirculação. A altura um pouco maior da pluma de contaminantes se deve à inclinação da pilha (que é de 38°), que faz com que as partículas, nesse ponto, adquiram uma altura um pouco maior de suspensão e uma abertura um pouco maior da zona de concentrações praticamente nulas (zona branca interior).

A Figura 5.34-(c) coincide com o final da zona de recirculação e a continuidade da esteira turbulenta, melhor representada pelo maior espalhamento do perfil de concentração na Figura 5.34-(d), distância de $8,5 h$. Uma vez que há, nessa região, uma menor influência da pilha em consonância com a esteira turbulenta, as partículas de menor tamanho aparecem nas maiores alturas da pluma, enquanto as maiores começam a tendência de saltos e de deposição no limiar da superfície.

A Figura 5.34-(e) e (f) demonstram o final da zona de recirculação e a retomada da esteira turbulenta, onde as partículas estão mais próximas à superfície, enquanto no item (g) há uma tendência das partículas menores que estão na superfície em ressuspender, enquanto algumas partículas que estão erodindo da pilha se juntam às ressuspensas, observado pelo perfil de concentração maior em maiores alturas. Por fim, percebe-se nos dois itens (i) e (j) uma tendência das partículas se acomodarem próximo à superfície, com uma maior uniformidade do perfil de concentração na área da Figura 5.34-(j), onde a influência da pilha é menor em relação ao escoamento incidente.

Vale ressaltar a condição de contorno utilizada na superfície (colisão elástica) pode influenciar no perfil de concentração próximo ao solo, no sentido de se ter partículas ricocheteando/refletindo com a mesma velocidade que incidiu na superfície. Outra condição de contorno que influencia o perfil é o fato das partículas que atingem as paredes laterais do domínio ser consideradas como excluídas do domínio.

A Figura 5.35 complementa os perfis de concentração, sendo representada nos mesmos planos onde foram calculadas as concentrações em função da altura. Dez paralelepípedos foram traçados, seguindo a metodologia já explicada da Figura 5.31. No entanto, cada paralelepípedo com dimensões de $0,01 \text{ m}$ (espessura) x $0,40 \text{ m}$ (altura) x $0,15 \text{ m}$ (largura) foi dividido em volumes cúbicos de $0,01 \text{ m} \times 0,01 \text{ m} \times 0,01 \text{ m}$, de modo que a concentração seja calculada nos volumes dos paralelepípedos, em unidades de g/cm^3 . No total são 6.000 pontos em cada um dos 10 paralelepípedos dispostos perpendiculares a direção do escoamento. Os valores nos itens de (a) até (j) se referem às posições em relação ao centro do domínio, onde estão as origens das coordenadas. Em cada perfil há uma sombra representando a pilha de

estocagem. Vale ressaltar que a pilha está à frente dos perfis de concentração retratados na Figura 5.35.

Na análise da Figura 5.35-a tem-se o perfil a distância de $1\ h$, o mais próximo da pilha. Observa-se, neste caso, um perfil vertical de concentração com valores em torno de 10^{-6} a $10^{-7}\ \text{g/cm}^3$, com exceção de duas zonas nas laterais, com maiores concentrações (aproximadamente $10^{-7}\ \text{g/cm}^3$), indicando que as laterais da pilha contêm as maiores emissões do perfil em estudo. Dentro da faixa de concentrações demonstrada pela paleta de cores, tem-se uma altura da pluma de até $0,2\ \text{m}$. Finalmente o perfil também demonstra emissões próximas ao solo até a altura da pilha.

À medida que há um afastamento da pilha de estocagem, há uma tendência a um espalhamento da pluma a maiores alturas, observado nos perfis na distância de $3,5\ h$, $6,0\ h$ e $8,5\ h$. A dispersão de partículas se torna maior, verificada no perfil de concentração nas regiões laterais da pilha até a altura de $0,2\ \text{m}$ do solo. Nos perfis de $13,5\ h$ e $16\ h$ tem-se um ligeiro aumento da concentração nas laterais próximas ao solo, ao mesmo tempo em que há uma diminuição do perfil acima da altura de $0,2\ \text{m}$.

Nos perfis seguintes, localizados nas distâncias de $18,5\ h$, $21\ h$ e $23,5\ h$, o espalhamento da pluma se consolida com tendência a uma homogeneização dos valores das concentrações até a altura de $0,2\ \text{m}$. Também a pluma chega a aproximadamente $0,6\ \text{m}$ próximo ao solo nas duas direções do eixo y , à esquerda e direita da origem.

A Figura 5.36 representa o perfil de concentração horizontal das partículas depositadas, tomadas em toda a superfície do domínio. Para isso, o domínio foi dividido em quadrados de $1\ \text{cm}$ (comprimento) x $1\ \text{cm}$ (largura), totalizando 42.750 pontos em que a concentração é calculada. Podem-se observar as áreas em que há mais partículas. Isso ocorre devido às zonas em que há um fluxo maior nas laterais da pilha, já representados na Figura 3.13 (2 e 3). As maiores concentrações encontradas foram de $2,21 \times 10^{-6}\ \text{g/cm}^3$, no final do domínio. As menores concentrações representadas são da ordem de $1 \times 10^{-7}\ \text{g/cm}^3$.

Algumas hipóteses (isoladas ou em conjunto) para as concentrações apresentadas imediatamente após a pilha podem ser feitas: *i*) zona de recirculação; *ii*) inclinação da pilha; *iii*) velocidade do vento ($6,5\ \text{m/s}$). A junção desses fatores faz com que as partículas sejam suspensas nessa região, voltando a depositarem em grande parte no final do domínio, com áreas de maiores concentrações. Cabe observar também concentrações muito baixas no centro do domínio (muito abaixo de 10^{-7}), na comparação entre a Figura 5.36-(a) e (b). Esta última

mostra as concentrações em intervalos menores: entre $2,21 \times 10^{-6} \text{ g/cm}^3$ e $1 \times 10^{-10} \text{ g/cm}^3$, e revela concentrações praticamente desprezíveis fora do “corredor” de maiores concentrações formadas ao longo do domínio. Esse “corredor” cria uma zona de turbulência e de recirculação a jusante, e, dada a inclinação de 38° , gera uma suspensão de partículas que em parte se depositaram a partir da segunda metade do domínio, aproximadamente após as faixas representadas pelas coordenadas $(y \geq 0,5; -0,3 \geq x \geq -0,5)$ e $(y \geq 0,5; 0,5 \geq x \geq 0,3)$. Também é possível verificar que praticamente não há partículas a montante da pilha, uma vez que o escoamento acontece a 90° da pilha, no mesmo sentido da coordenada y do domínio.

A Figura 5.37 serve de apoio às considerações descritas na Figura 5.36, com o perfil de cisalhamento médio na superfície do domínio (a) e na superfície da pilha (b). As cores em destaque nas laterais da pilha e da superfície reforçam a ideia de que as maiores velocidades médias levam a uma maior suspensão dessas áreas, o que faz refletir os formatos demonstrados dos perfis de concentração da Figura 5.36.

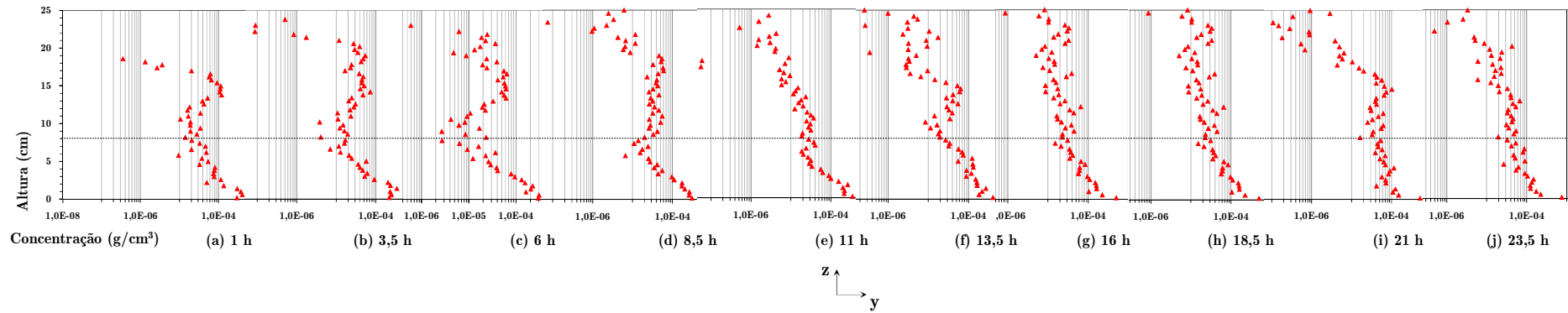


Figura 5.32 – Esquema de apresentação do perfil de concentração em função da altura, em intervalos de 20 cm a jusante da pilha (2,5 h), para partículas de 100 μm .

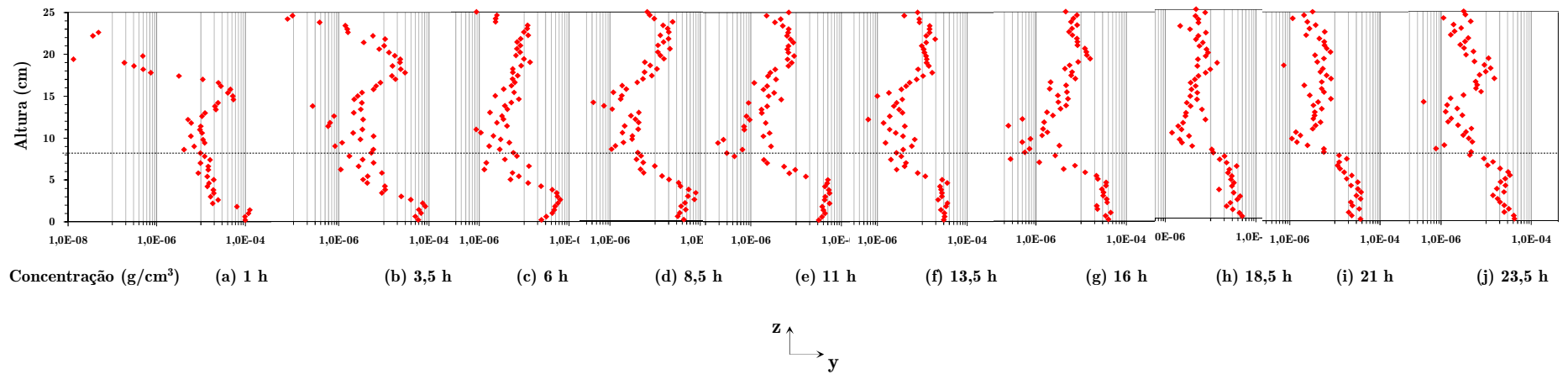


Figura 5.33 – Esquema de apresentação do perfil de concentração em função da altura, em intervalos de 20 cm a jusante da pilha (2,5 h), para partículas de 194 μm .

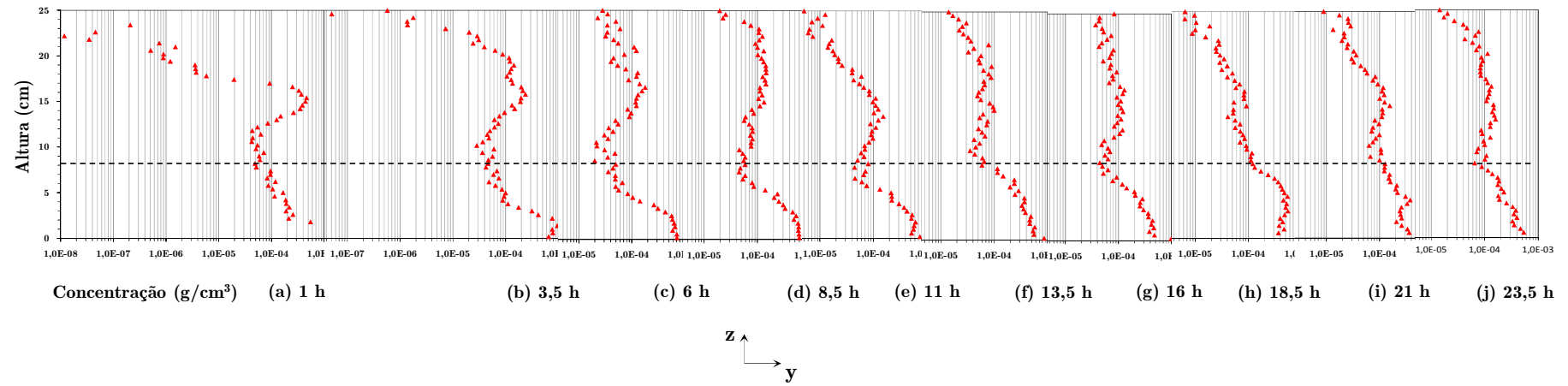


Figura 5.34 – Esquema de apresentação do perfil de concentração em função da altura, em intervalos de 0,20 m a jusante da pilha (2,5 *h*), para todos os tamanhos de partículas.

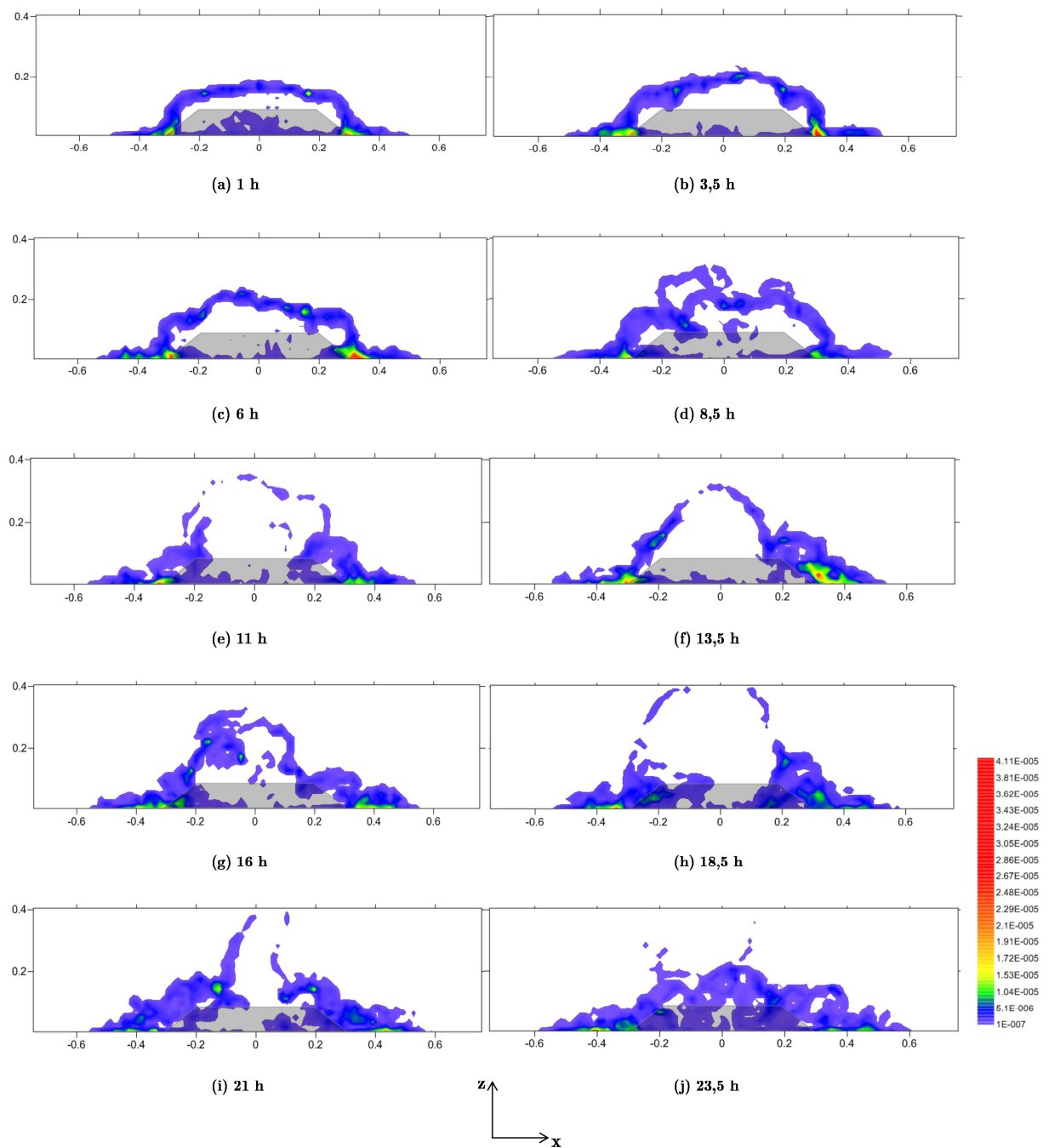


Figura 5.35 – Esquema de apresentação da variação do perfil de concentração instantânea (após 3s de simulação com partículas) no plano transversal ao escoamento, em intervalos de 0,20 m a jusante da pilha (2,5 h), para todos os tamanhos de partículas. A sombra à frente do perfil representa a pilha de estocagem em formato *oblong*.

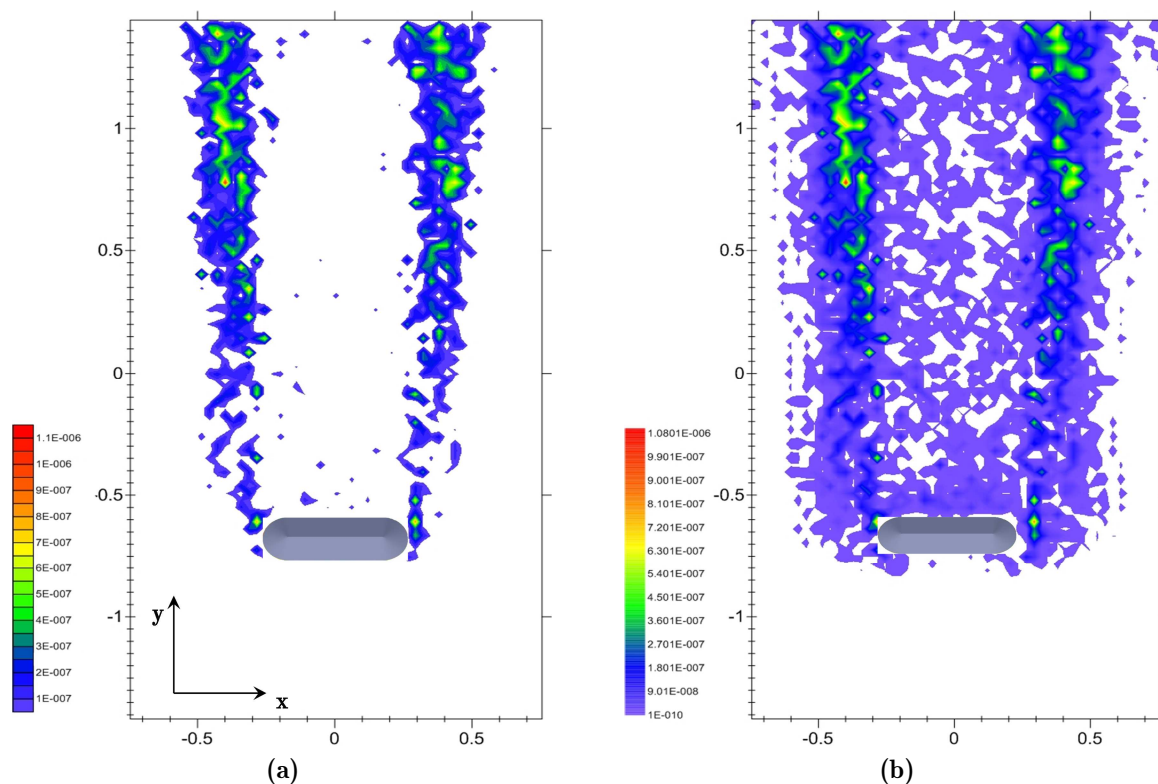


Figura 5.36 – Esquema de apresentação da distribuição de concentração instantânea (após 3s de simulação com partículas) na superfície do domínio ($z=0$): (a) intervalo entre 1.1×10^{-6} a 1×10^{-7} g/cm^3 ; (b) 1.1×10^{-6} a 1×10^{-10} g/cm^3

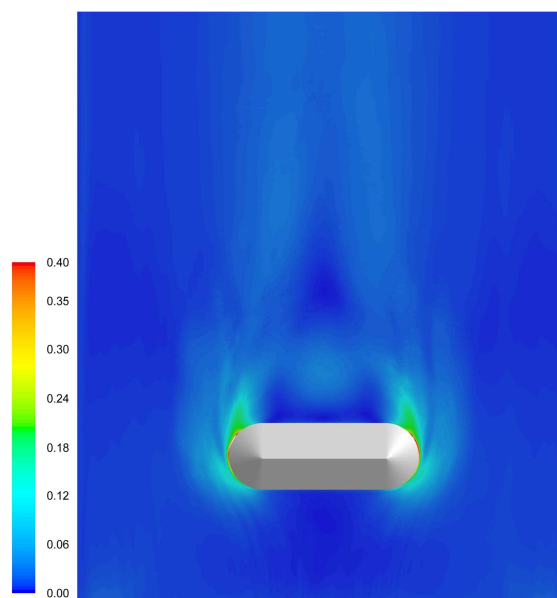


Figura 5.37 – Perfil de cisalhamento médio na superfície do domínio de estudo ($z=0$).

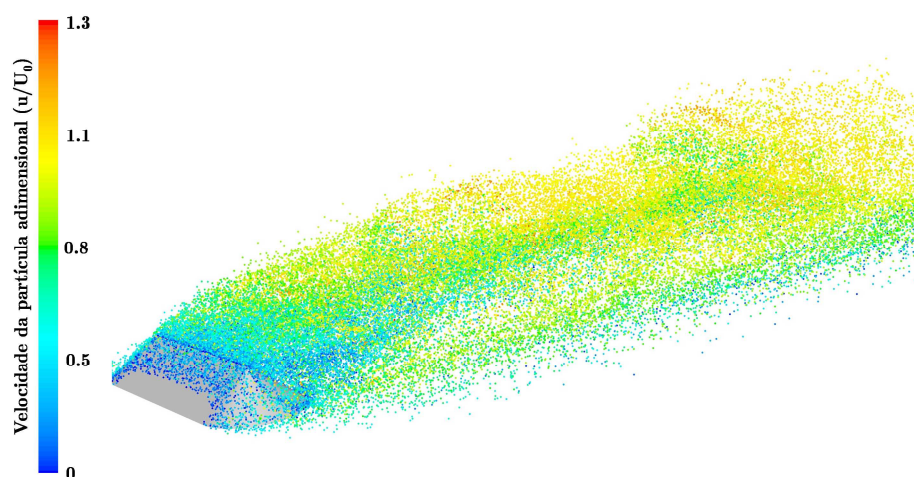


Figura 5.38 – Velocidade instantânea adimensional das partículas ao longo do domínio, visão isométrica, $U_0=6,5$ m/s (após 3s de simulação com partículas).

Também é possível verificar na Figura 5.38 uma menor quantidade de partículas a jusante da pilha na superfície, demonstrando as velocidades das partículas em movimento de saltos. Na zona de recirculação as partículas estão em grande quantidade e as velocidades são muito baixas. Também podem ser percebidas algumas partículas com velocidade zero ao longo das regiões laterais da pilha, e outras com grande velocidade (acima da velocidade de superfície livre) em algumas posições do domínio na região em que o fluido se encontra acelerado, proveniente da aceleração demonstrada na Figura 5.20.

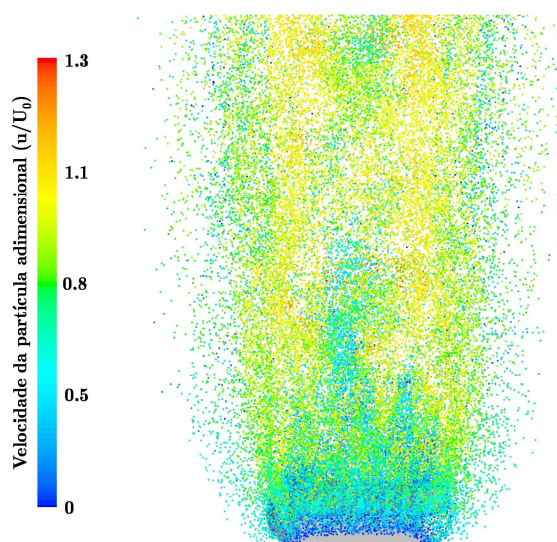


Figura 5.39 – Velocidade instantânea adimensional das partículas ao longo do domínio, visão superior, $U_0=6,5$ m/s (após 3s de simulação com partículas).

A Figura 5.39 apresenta uma visão superior da representação das velocidades instantâneas adimensionais das partículas. Segundo essa visão, há uma maior quantidade de partículas a

velocidades próximas da velocidade da superfície livre, além de partículas com velocidade zero no entorno da pilha.

O objetivo da Figura 5.40 é dar um detalhamento um pouco maior das velocidades das partículas na zona de recirculação, a partir de um plano que passa no centro do domínio ($x=0$). Nesse caso, percebem-se um acúmulo das partículas com baixas velocidades que estão na zona de recirculação, enquanto as que adquiriram velocidades maiores escapam da zona de recirculação. É possível ver também as partículas que foram injetadas na superfície da pilha com velocidade adimensional inicial zero, enquanto outras já com velocidades em voo, e ainda outras que não adquiriram velocidades suficientes para escapar da zona de recirculação. Vale ressaltar que as partículas têm cinco diferentes diâmetros, e possivelmente as maiores conseguiram escapar da zona de recirculação, ao observar o equilíbrio das forças gravitacionais e de arrasto. É interessante o comportamento das partículas em relação às suas velocidades nas laterais da pilha. Têm-se, nesse caso, mais partículas com velocidades instantâneas adimensionais maiores na região mais próxima da pilha, reforçando a ideia do fim da zona de recirculação e tendência de arraste de partículas com maiores velocidades nessa região.

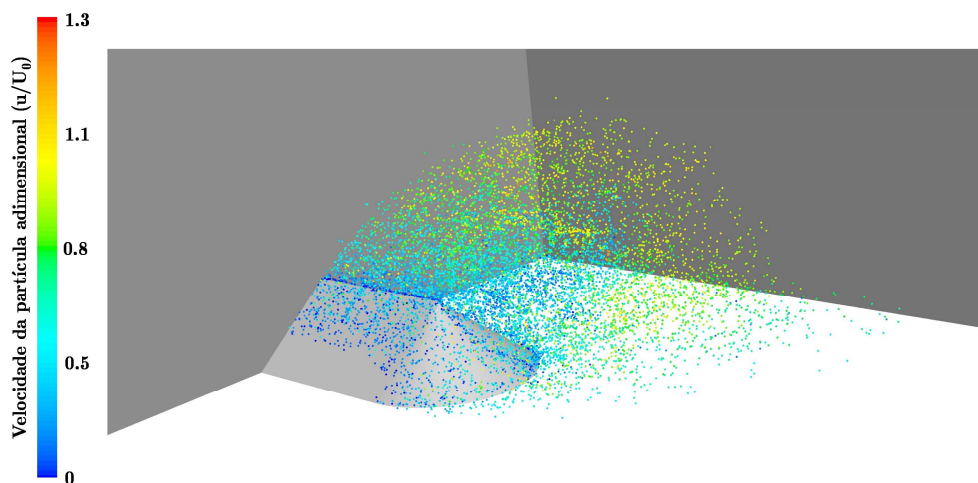


Figura 5.40 – Velocidade instantânea adimensional das partículas ao longo do domínio, visão isométrica com plano no centro da pilha paralelo à direção do escoamento, $U_0=6,5$ m/s (após 3s de simulação com partículas).

Na Figura 5.41 pode-se notar a contribuição da velocidade vertical nos fenômenos de deposição e suspensão das partículas no domínio. De modo geral, as partículas delimitadas pela área A tem no início (a jusante da pilha) muitas partículas com velocidade vertical instantânea em torno de 40% da velocidade da superfície livre (U_0), indicando que estão em voo e ainda tem energia cinética para continuarem a trajetória de suspensão. Ainda dentro

dessa área, percebe-se que à medida que há um afastamento da região da zona de recirculação da pilha, as partículas têm uma diminuição da velocidade vertical, e poucas partículas com velocidades em torno de 40% de U_0 . Na área B pode-se observar a maioria das partículas com velocidades negativas ou próximas de zero, o que demonstra que as partículas tem uma tendência de depositarem na superfície.

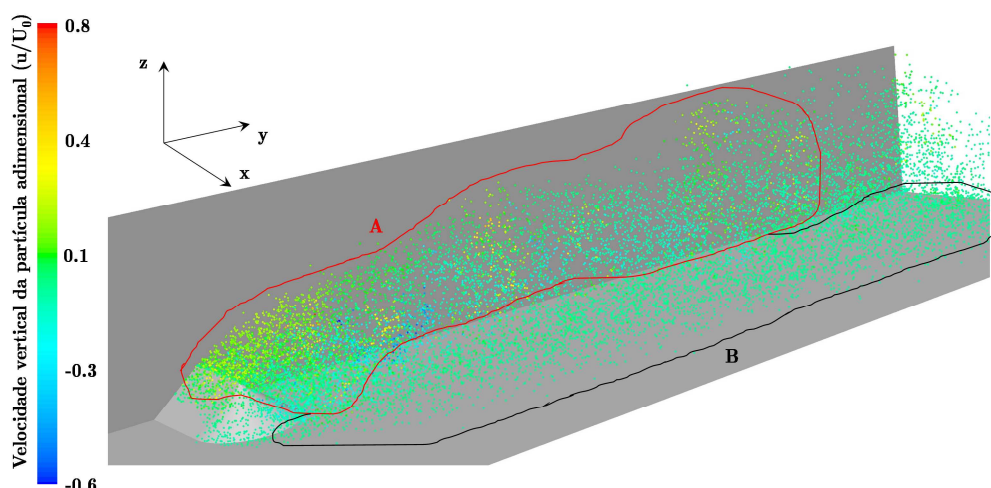


Figura 5.41 – Esquema de apresentação da velocidade instantânea vertical adimensional das partículas ao longo do domínio, visão superior, $U_0=6,5$ m/s (após 3s de simulação com partículas).

A Figura 5.42 permite fazer uma análise das partículas em relação ao seu diâmetro, por meio do plano em $x=0$. Cabe observar que a maior quantidade de partículas que se envolvem com a zona de recirculação tem os menores diâmetros. Pode-se inferir que, apesar de estarem menos sujeitas à força peso, as turbulências formada a jusante da pilha na zona de recirculação fez com que essas partículas fossem acumuladas durante algum tempo nessa região. Pode-se também perceber partículas de maiores tamanhos ao redor da pilha e poucas na zona de recirculação. Poucas partículas de tamanhos intermediários estão na zona de recirculação, ficando grande parte delas uniformemente distribuídas ao longo do domínio a jusante da pilha, mas fora da zona de recirculação.

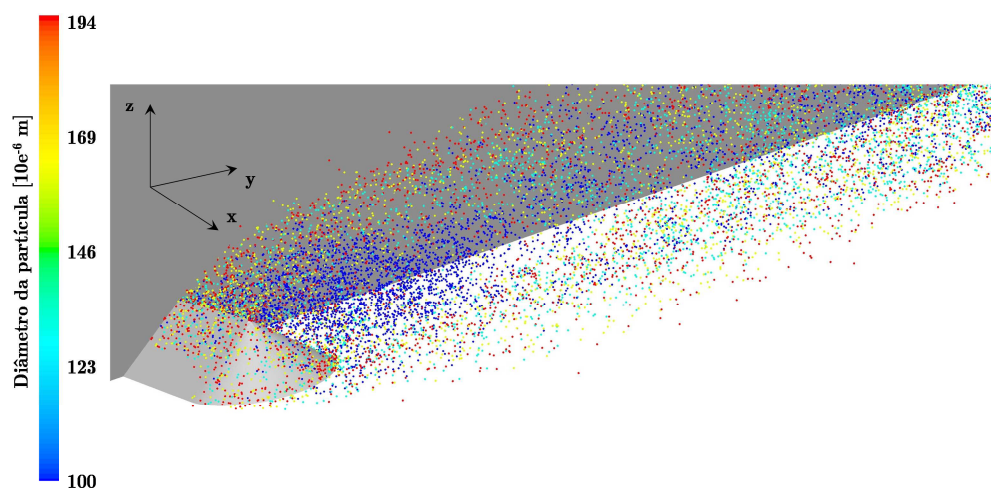


Figura 5.42 – Esquema de distribuição do diâmetro da partícula ao longo do domínio, plano $x=0$, $U_0=6,5$ m/s (após 3s de simulação com partículas).

6 CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

O objetivo proposto nesse trabalho foi de investigar a suspensão, deposição, ressuspensão e dispersão de material particulado de diferentes tamanhos emitidos de uma pilha de estocagem. Para isso foram realizadas simulações numéricas utilizando o modelo de emissão USEPA modificado, o modelo de turbulência LES para simular o escoamento atmosférico em condições de estabilidade neutra e, finalmente, a abordagem lagrangiana de movimento das partículas emitidas de pilhas de estocagem no formato *oblong*. O modelo de emissão USEPA modificado foi utilizado para estimar a taxa de emissão de partículas que depende da tensão de cisalhamento na superfície da pilha, determinada pela simulação numérica na fase fluido. A taxa de emissão de partículas foi utilizada como dado de entrada para o modelo lagrangiano para descrição da dispersão atmosférica das partículas.

Não houve necessidade de refinamento da malha, uma vez que os procedimentos de geração foram herdados dos trabalhos de Furieri (2012), que já tinham sido validados em seu trabalho. Com isso, a malha conseguiu atender a representação dos vórtices turbulentos gerados pelo escoamento incidente, como a zona de recirculação e a esteira turbulenta, com erros menores que 2% em relação a experimentos de PIV (Turpin, 2010).

Como condição de contorno na entrada, foi utilizada uma geração de turbulência sintética, que no ambiente CFD Ansys Fluent 14.0 é denominada de *Spectral Synthesizer* (Smirnov, Shi e CELIK, 2001). Esse modelo mostrou-se satisfatório, dados os percentuais de erro relativo descritos nos perfis verticais e horizontais do escoamento aproximadamente 6%.

Em seguida, com relação à validação do escoamento e dispersão, foi feita uma simulação numérica executada sobre o experimento em túnel de vento de Zhang, Wang e Lee (2007). Os resultados relativos ao escoamento reproduziram o perfil de velocidade média em função da altura, enquanto a intensidade turbulenta representaram diferenças de até 2% no máximo em relação ao experimento. O perfil log-linear da concentração foi comparado com o experimento em túnel de vento de Zhang, Wang e Lee (2007), apresentando diferenças de uma ordem de grandeza na altura até 1 mm.

Essas diferenças podem ser justificadas pelo baixo desempenho do PIV em distâncias muito próximas do solo, documentados em Turpin (2010), aliado ao perfil médio do modelo de turbulência LES nas pequenas escalas, uma vez que são modeladas, enquanto as grandes escalas são resolvidas. No cálculo da concentração das partículas houve uma diferença: enquanto no experimento o tratamento das imagens foi feita uma média temporal somente, na

simulação numérica houve cálculo de média espacial e temporal. O resultado da validação foi considerado satisfatório pela boa concordância entre a simulação e o experimento, com exceção da zona próxima a superfície.

Dando continuidade a validação do escoamento, dois parâmetros escalares foram monitorados no que tange à análise do escoamento: *Q-criterion* normalizado e número de Courant, sendo que o primeiro representou valores entre 0,7 e 4 e o segundo entre 0,07 e 3, atendendo aos requisitos de representação dos vórtices e do escoamento turbulento.

Seis perfis foram monitorados ao redor da pilha, de modo a validar o escoamento, e comparados a experimentos em PIV (Turpin, 2010), sendo quatro perfis verticais e dois horizontais de velocidade média. Os maiores erros relativos médios ficaram em 8% no perfil que tenta representar o escoamento médio a jusante da pilha, localizado na coordenada $(x, y, z)=(0,144, 0,205, 0)$, demonstrando dificuldade em representar o perfil de velocidade média a jusante da pilha, na direção do equivalente, nos obstáculos cúbicos, ao vórtice da ferradura. A validação do escoamento teve erro relativo médio de 6%. No entanto, observou-se boa concordância próxima à superfície, quando comparado ao experimento.

Como resultado da modelagem da turbulência, a zona de recirculação localizada a jusante da pilha na direção do escoamento incidente foi representada com grande sucesso, com erro de 1,5% na distância entre a zona de recolamento simulada numericamente e o experimento com PIV (Turpin, 2010). Outras representações qualitativas foram feitas no que se refere à velocidade média, flutuações e cisalhamento, além das iso-superfícies u_s/u_r , com boas representações do escoamento na superfície da pilha e no restante do domínio. Conclui-se, assim, que houve boa reprodução do ponto de recolamento.

Assim, com os resultados obtidos das simulações do escoamento no que se refere à modelagem da turbulência, pode-se afirmar que a geração sintética da turbulência mostrou ser uma boa alternativa como condição de entrada do domínio.

Em seguida, foram investigados os fenômenos de deposição, suspensão e ressuspensão das partículas emitidas da pilha. Vale ressaltar que a injeção de partículas no domínio foi feita seguindo uma curva exponencial, ou seja, as partículas seguem a tendência de diminuir sua emissão da pilha ao longo do tempo, até o limite denominado tempo de pavimentação, em que a emissão de partículas é desprezível.

No entanto, o tempo que as partículas foram emitidas pela pilha considerando o decaimento temporal total é muito alto para uma simulação completa (em torno de 8 minutos). O tempo médio de execução das simulações após a injeção de partículas foi de 30 segundos por passo de tempo ($\Delta t = 10^{-3}$ s), o que significa que uma completa simulação demoraria aproximadamente 70 dias ininterruptamente, nas mesmas condições de estabilidade neutra. Optou-se por salvar arquivos a cada 0,5 segundo após a injeção de partículas (com objetivo de pós-processamento) e surgiu outro entrave à simulação completa: o tamanho dos arquivos gerados: até 10 GB de dados a cada 0,5 segundo de processamento.

Nesse sentido, foi simulada a curva de decaimento temporal por 4 segundos após a injeção de partículas e analisadas a suspensão, deposição e ressuspensão das partículas após cada 0,5 segundos, de modo a observar os fenômenos no momento em que se iniciam.

Mesmo com os problemas relatados no que se refere ao tempo de processamento para os modelos propostos neste trabalho, foi possível analisar os fenômenos de suspensão, ressuspensão, deposição e dispersão, embora a simulação não tenha atingido o tempo de pavimentação.

Na etapa de pós-processamento, diversas análises foram efetuadas, gerando os gráficos entre dois intervalos de tempo: i) Massa das partículas presentes no domínio no instante t_1 e que permanecem no domínio no instante t_2 ; ii) Partículas depositadas no instante t_1 e no instante t_2 que continuam depositadas dentro do domínio; iii) Partículas que no instante t_1 estão suspensas e no instante t_2 continuam suspensas dentro do domínio; iv) Partículas que no instante t_1 estão depositadas e no instante t_2 estão suspensas dentro do domínio (ressuspensão); v) Partículas que no instante t_1 estão depositadas e no instante t_2 estão fora do domínio; vi) Partículas que no instante t_1 estão suspensas e no instante t_2 estão fora do domínio; vii) Partículas que estavam suspensas em t_1 e estão depositadas em t_2 ; viii) Partículas que não estão presentes no domínio em t_1 e estão depositadas em t_2 (novas deposições); ix) Partículas que não estão presentes no domínio no instante t_1 e estão suspensas no instante t_2 (novas suspensões). Os resultados em geral demonstraram que, após a injeção de partículas nas iso-superfícies da pilha, assim que as partículas começam a emissão, após o instante inicial há uma tendência em permanecer constante nos pontos seguintes na maioria das análises. Com exceção de alguns pontos intermediários que apareceram e que não seguem esse padrão (e que necessitam de mais investigação), percebe-se que à medida que as partículas saem do domínio, outras são repostas pela emissão da pilha durante o tempo da

análise. A mesma observação vale para a suspensão, deposição e ressuspensão das partículas do domínio.

O tempo de processamento para os modelos acoplados utilizados (emissão USEPA, turbulência LES – abordagem Euleriana e movimento das partículas – abordagem lagrangiana) foi de dois meses no modelo de turbulência $k - \omega$ SST como condição inicial. Em seguida, para que o escoamento estivesse completamente desenvolvido no modelo LES foram necessários aproximadamente 150000 passos de tempo, com variação entre 15 a 30 segundos por passo de tempo. Um grande complicador foi a quantidade de partículas inseridas no domínio: em torno de 60 milhões na maioria das simulações.

Os resultados das simulações levaram a algumas conclusões:

- Os resultados da concentração instantânea a jusante da pilha demonstraram como se comportam as partículas depositadas após serem emitidas, indicando que uma das áreas da pilha mais sensíveis e sujeita a maiores emissões são as laterais, pelos altos valores de velocidade normalizada nestas iso-superfícies. As maiores concentrações foram da ordem de 10^{-6} g/cm^3 , em áreas da metade do domínio em diante (na direção do escoamento) e após o fim da zona de recirculação.
- Foram observadas altas concentrações instantâneas de partículas suspensas no tempo de simulação em relação às concentrações de partículas depositadas: até três ordens de grandeza. Uma possibilidade de explicação é a contínua emissão da pilha, em conjunto com o ângulo de inclinação favorecendo a suspensão, o número de Reynolds (em torno de 3×10^5) e a zona de recirculação que tende a manter grande quantidade de partículas em suspensão. Houve grande influência da zona de recirculação nos perfis verticais e horizontais de concentração.
- A ordem de grandeza da massa de partículas ressuspensas foi de 10^{-6} g , aumentando e mantendo-se no patamar de aproximadamente 10^{-5} g durante o tempo de simulação restante. Assim, pode-se observar que o acoplamento do modelo de emissão USEPA modificado (adaptado) ao modelo de dispersão permitiu a determinação da quantidade de partículas emitidas da pilha de estocagem na mesma ordem de grandeza de pilhas reais.
- Os perfis verticais de concentrações resultaram em curvas que demonstraram um aumento dos seus valores no solo até a altura de referência (altura da pilha=0,08 m), voltando a diminuir após essa altura. Isso se deve à aceleração do fluido que acontece imediatamente

após a pilha, observando a direção do escoamento. Esse comportamento no geral aconteceu ao longo de quase todo o domínio estudado a jusante da pilha. No entanto, percebe-se uma diminuição no gradiente de concentração à medida que se afasta da pilha, e, por conseguinte, da zona de recirculação formada a jusante.

As observações são semelhantes para as partículas quando analisadas todas as faixas granulométricas em conjunto e somente uma faixa (100 μm), sendo que a análise de somente a faixa de 100 μm observou-se uma menor variação da concentração nas zonas próximas ao fim do domínio da simulação, devido à menor influência da esteira turbulenta.

- Houve uma grande influência da zona de recirculação e da esteira turbulenta no estudo das concentrações, tanto nos perfis horizontais quanto nos verticais. Houve variações de concentração entre patamares de 10^{-4} g/cm^3 e 10^{-6} g/cm^3 , valores dentro da faixa de ordem de grandeza do experimento em leito de partículas.

- Grande quantidade de partículas apresentou velocidade normalizada (velocidade de referência igual a 6,5 m/s) maior que a unidade e também grande quantidade com velocidade abaixo da metade da velocidade da superfície livre, sendo que o primeiro ocorreu devido à aceleração do fluido em decorrência da inclinação da pilha e a pouca influência da força gravitacional, enquanto o segundo devido às partículas ainda não ter sido aceleradas o suficiente para suspender durante todo o domínio.

- As áreas laterais da pilha tem maior influência na dispersão das partículas ao longo do domínio, pois se verificou que essas áreas têm maior razão u_s/u_r , apesar de, aparentemente, se esperar que o topo da pilha tivesse maior influência.

- Ao traçar um plano vertical no meio da pilha, na direção paralela ao escoamento, no que se referem à velocidade instantânea normalizada vertical, duas grandes áreas puderam ser observadas, sendo uma com a maior parte das partículas com velocidade acima de 40% da velocidade na superfície livre, e outra parte (mais próximas do solo) com velocidades próximas de zero. Assim, o primeiro grupo tendeu a permanecer com partículas suspensas, enquanto o segundo grupo estavam próximos da deposição.

- A abordagem lagrangiana permitiu a análise da suspensão, deposição e ressuspensão, por meio do acompanhamento das partículas no espaço e tempo.

A Tabela 6-1 abaixo demonstra o que já existe na literatura científica e o que é contribuição desse trabalho com relação ao tópico abordado.

Tabela 6-1 – Trabalhos envolvendo simulações existentes na literatura científica e contribuições desse trabalho.

Literatura científica	Contribuição
Escoamento ao redor de obstáculos de diversos formatos utilizando modelagem de turbulência RANS e LES, com exceção de LES para pilhas de estocagem.	Escoamento ao redor de pilhas utilizando modelagem de turbulência LES ao redor de pilhas de estocagem.
Abordagem lagrangiana para simulações envolvendo partículas de diversos tamanhos a partir de superfícies planas e distribuídos homogeneamente e na superfície de pilhas utilizando o modelo geral USEPA para pilhas de estocagem.	Acoplamento do modelo Euleriano (utilizando o modelo de turbulência LES) ao Lagrangiano, tendo como condição de entrada de partículas o modelo USEPA para pilhas de estocagem modificado e adaptado.
Cálculo de emissões e dispersões a partir de modelos de turbulência RANS em pilhas de estocagem.	Cálculo da dispersão, suspensão, deposição e ressuspensão de partículas emitidas de pilhas de estocagem em formato <i>oblong</i> , com partículas de diversas granulometrias e modelo de turbulência LES.
Demonstração de perfis de concentração espacial em pilhas de estocagem com modelo de turbulência RANS.	Demonstração de perfis de concentração espacial e temporal em pilhas de estocagem com modelo de turbulência LES e modelo USEPA adaptado e modificado para acoplamento ao modelo de dispersão.
Pós-processamento para demonstração das emissões e dispersões.	Desenvolvimento de softwares para acoplar modelo USEPA modificado e adaptado ao modelo de dispersão e também para demonstração da dispersão, suspensão, deposição e ressuspensão de partículas a partir da pilha de estocagem de granulados.

Como trabalhos futuros, algumas sugestões podem ser listadas:

- Desenvolver uma investigação em múltiplas pilhas, observando direções e velocidades predominantes nos sítios onde se encontram as pilhas, de forma a responder às questões de combinações desses parâmetros que mais afetam a qualidade do ar.
- Mostrar variações de direções do escoamento incidente em relação à pilha onde há possibilidade de maiores emissões;
- Fazer uma análise completa dos movimentos das partículas emitidas da pilha desde o início da emissão até o tempo de pavimentação, verificando o comportamento dos fenômenos de suspensão, deposição, ressuspensão e dispersão do material particulado;
- Aumentar a faixa granulométrica e fazer análise do momentum dessas partículas e analisar sua capacidade em percorrer distâncias maiores na atmosfera;
- Fazer uma análise com diferentes modelos de colisão e verificar qual a influência da mudança nesses modelos na avaliação dos fenômenos de suspensão, deposição, saltos, rolamento, ressuspensão e dispersão do material particulado emitido da pilha.
- Diminuir as simplificações na simulação numérica por meio da inserção de interações partícula-ar e partícula- partícula (*two way coupling* e *four-way coupling*, respectivamente), de modo a verificar as suas influências principalmente no fenômeno de saltos, o que pode influenciar outros fenômenos: suspensão, deposição e ressuspensão de material particulado emitido da pilha de estocagem.
- Apesar do baixo erro relativo da técnica de geração de turbulência na entrada, é importante avaliar outras técnicas sintéticas ou a técnica denominada domínio precursor, de modo a tentar diminuir o erro relativo encontrado nos perfis quando comparado ao experimento. Em conjunto a essas mudanças, pode-se refinar a malha em locais mais estratégicos onde houver avaliação de escoamento com perfis verticais e horizontais.

7 REFERÊNCIAS

- ADAMS, J.F.W. FAIRWEATHER, M.; YAO, J. Modelling and simulation of particle re-suspension in a turbulent square duct flow. **Computer and Chemical Engineering**, Vol. 35, pp. 893-900, 2011.
- ALDERLIESTEN, M. Mean particle diameters. Part VII. The Rosin-Rammler size distribution: physical and mathematical properties and relationships to moment-ratio defined mean particle diameters. **Particle Systems Characterization**, 30, 244-257, 2013.
- ALTARATZ, 2014; KOREN, I.; REMER, L.A.; HIRSCH, E. Review: Cloud invigoration by aerosols - Coupling between microphysics and dynamics. **Atmospheric Research**, 140-141. pp. 38-60. 2014.
- AMUNDSEN, A. H.; KLAEBOE, R.; FYHRI, A. Annoyance from vehicular air pollution: Exposure-response relationships for Norway. **Atmospheric Environment**. Vol. 42, pp. 7679-7688. 2008.
- ANSYS FLUENT. **Fluent Theory Guide v. 14.0**. Disponível em: www.ansys.com. Acesso em: 11 dez. 2013.
- ARYA, S.P. **Air Pollution Meteorology and Dispersion**. Oxford University Press. 1a Ed. New York. EUA. 1999.
- BADR, T.; HARION, J. L. Effect of aggregate storage piles configuration on dust emissions. **Atmospheric Environment**. v. 41, p. 360-368, 2007.
- BADR, T.; HARION, J. L. Numerical modelling of flow over stockpiles: implications on dust emissions. **Atmospheric Environment**. v. 39, p. 5576-5584, 2005.
- BAGNOLD, R.A. **The physics of blown sand and desert dunes**. Metheun Press, London, 265 p., 1941.
- BAILEY, A.G.; BALACHANDRAN, W.; WILLIAMS, T.J. The Rosin-Rammler size distribution for liquid droplet ensembles. **J. Aerosol Sci.**, Vol. 14, No. 1, pp. 39-46, 1983.
- BEN-CHEIKH, N.; HAMMAMI, F.; CAMPO, A.; BEN-BEYA, B. A dynamic sub-grid scale model for large eddy simulation of turbulent flows in a lid-driven cubical cavity. **Comptes Rendus Mecanique**, Vol. 340, pp. 721-730, 2012.
- BERROUK, S.A.; LAURENCE, D. Stochastic modelling of aerosol deposition for LES of 90° bend turbulent flow. **International Journal of Heat and Fluid Flow**. v. 29, p. 1010-1028, 2008.
- BLOCKEN, B.; TOMINAGA, Y.; STATHOPOULOS, T. CFD simulation of micro-scale pollutant dispersion in the built environment. **Building and Environment**. Vol. 64, pp. 225-230, 2013.
- BORGES, A.D.S. **Simulação das Grandes Escalas de Escoamentos de Camada Limite Turbulenta**. Tese de doutorado. Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro. Portugal, 2007.
- BOWLING, R.A. A theoretical review of particle adhesion. Mttal, K.L. (Ed.). **Particles on Surface 1: Detection, Adhesion and Removal**, pp. 129-142, 1988.
- BRACH, R.M.; DUNN, P.F. A Mathematical Model for the Impact and Adhesion of Microspheres', **Aerosol Science and Technology**, Vol. 16, pp. 51-64, 1992.

- BRACH, R.M.; DUNN, P.F.; Li, X. Experiments and Engineering Models of Microparticle Impact and Deposition', *Journal of Adhesion*, Vol. 74, pp. 227-282, 2000.
- CABOT, W.H.; MOIN, P. Approximate wall boundary conditions in the large-eddy simulation of high Reynolds numbers flows. **Flow Turb. Combust.** Vol. 63, pp. 269-291, 2000.
- CEBECI, T.; COUSTEIX, J. **Modeling and Computation of Boundary-Layer Flows**. 2a. Ed. Springer. 2005. Long Beach, California.
- CEZANA, F.C. Simulação numérica da dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo isolado sob diferentes condições de estabilidade. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-graduação em Engenharia Ambiental. Universidade Federal do Espírito Santo. Vitória-ES. Brasil. 139 pp. 2007.
- CFX 13 (2010). **Documentation - Modelling Guide**. Disponível em: www.ansys.com. Acesso em: 28 jun. 2011.
- CIERCO, X. F.; NAAIM, M.; NAAIM-BOUVET, F. Experimental study of particle concentration fluctuations in a turbulent steady flow. **Annals of Glaciology**. v. 49, p.121-126, 2008.
- CLAUSER, F.H. Turbulent Boundary Layers in Adverse Pressure Gradients. **AAIA Journal of the Aeronautical Sciences**, Vol. 21, No. 2, 1954, pp. 91-108.
- CONG, X.C.; CAO, S.Q.; CHEN, Z.L.; PENG, S.T.; YANG, S.L. Impact of the installation scenario of porous fences on wind-blown particle emission in open coal yards. **Atmospheric Environment**, vol. 45, pp. 5247-5253, 2011.
- CPM RT 204/10. **Estudo de novas alternativas para controle das fontes de emissões fugitivas de Pátio de Carvão através de modelagem CFD**. Relatório Técnico. Julho 2010. Rev. 00.
- DAHNEKE, B. Further measurements of the bouncing of small latex spheres. **Journal of Colloid and Interface Science**, Vol. 51, pp. 58-65, 1975.
- DESCAMPS, I. **Erosion éolienne d'un lit de particules à large spectre granulométrique**. Thèse de Doctorat, Univ. de Valenciennes et du Hainaut Cambresis. França, 2004.
- DIEGO, I.; PELEGRY, A. TORNÓ, S. TORAÑO; MENENDEZ, M. Simultaneous CFD evaluation of wind flow and dust emission in open storage piles. **Applied Mathematical Modelling**. v. 33, p. 3197-3207, 2009.
- DURAN, O.; CLAUDIN, P.; ANDREOTTI, B. On aeolian transport: Grain-scale interactions, dynamical mechanisms and scaling laws. **Aeolian Research**. Vol. 3, pp. 243–270, 2011.
- FARIA, R.; FERREIRA, A.D.; SISMEIRO, J.L.; MENDES, J.C.F.; SOUSA, A.C.M. Wind tunnel and computational study of the stoss slope effect on the aeolian erosion of transverse sand dunes. *Aeolian Research*, 3(3): 303 – 314, 2011.
- FARIMANI, A.B.; FERREIRA, A.D.; SOUSA, A.C.M. Computational modeling of the wind erosion on a sinusoidal pile using a moving boundary method. **Geomorphology**, vol. 130, p. 299–311, 2011.
- FARMER, A. M. The effects of dust on vegetation - a review. **Environmental Pollution**, Vol. 79, pp. 63-75, 1993.

- FEDERER, H. The Gauss-Green Theorem. **Amer. Math. Soc.** Disponível em: <http://www.ams.org/journals/tran/1945-058-00/S0002-9947-1945-0013786-6/S0002-9947-1945-0013786-6.pdf>. Acesso em: 05 set. 2014.
- FERREIRA, A. D.; OLIVEIRA, R.A. Wind erosion of sand placed inside a rectangular box. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v. 97, pp. 1–10, 2009.
- FERREIRA, A.D.; LAMBERT, R. J. Numerical and wind tunnel modeling on the windbreak effectiveness to control the aeolian erosion of conical stockpiles. **Environ Fluid Mech.**, v. 11, pp. 61–76, 2011.
- FINLAYSON-PITTS, B. J.; PITTS JR., J. N. **Chemistry of the Upper and Lower Atmosphere – Theory, Experiments and Applications**, Academic Press, 2000.
- FOUCAUT, J.M. Etude theorique et experimentale des phenomenes d’envol et de saltation de particules dans une couche limite turbulente. Thèse de Doctorat, Univ. de des Sciences et Technologies de Lille. França, 1994.
- FURIERI, B. **Erosion Éolienne de Tas de Stockage de Matières Granulaires sur Sites Industriels : Amélioration des Méthodes de Quantification des Émissions**. 2012. 214f. Thèse (Spécialité: Mécanique et Énergétique). L’École des mines de Douais et L’Université de Valenciennes et du Hainaut-Cambrésis. Douai, France.
- FURIERI, B.; RUSSEIL, S.; SANTOS, J.M.; HARION, J.L. Effects of non-erodible particles on aeolian erosion: Wind-tunnel simulations of a sand oblong storage pile. **Atmospheric Environment**, vol. 79, p. 672-680, 2013.
- GERMANO, M.; PIOMELLI, U.; MOIN, P.; CABOT, W.H. A dynamic sub-grid scale eddy viscosity model. **Physics of Fluids**. Vol. 3. pp. 1760-1765, 1991.
- GILLETE, D.; MARTICORENA, B.; BERGAMETTI, G. Change in the aerodynamic roughness height by saltating grains: Experimental assessment, test of theory, and operational parameterization. **Journal of Geophysical Research**, Vol. 103, No. D6, pp. 6203-6209, 1998.
- GILLETTE, D.; STOCKTON, P. The effect of nonerodible particles on wind erosion of erodible surfaces. **Journal of Geophysical Research**, 94:12885–12893, 1989.
- GOUSSEAU, P., BLOCKEN, B., VAN HEIJST, G.J.F. CFD simulation of pollutant dispersion around isolated buildings: On the role of convective and turbulent mass fluxes in the prediction accuracy. **Journal of Hazardous Materials**, 194: 422-434. 2011.
- GOUSSEAU, P., BLOCKEN, B., VAN HEIJST, G.J.F. Quality assessment of Large-Eddy Simulation of wind flow around a high-rise building: Validation and solution verification. **Computers & Fluids** 79 (2013) 120–133.
- GRAND, G.; TABAKOFF, W. Erosion prediction in turbomachinery resulting from environmental solid particles. **Journal of Aircraft**, vol. 12, pp. 471-478, 1975.
- HOLGATE, S. T.; SAMET, J. M.; KOREN, H.S; MAYNARD, R. L. **Air Pollution and Health**. 1a. Ed. 1999. Academic Press. London. UK.
- HOSKER, R. P. Jr. Dispersion in the vicinity of buildings. Second Conference on Applications of Air Pollution and Second Conference of Industrial Meteorology. American Meteorology Society. 24-28. New Orleans, USA. pp. 92-107, 1980.
- HUANG, S.H.; LI, Q.S.; WU, J.R. A general inflow turbulence generator for large eddy simulation. **J. Wind Eng. Ind. Aerodyn.** Vol. 98, p. 600–617, 2010.

HUANG, W.; TAN, J.; KAN, H.; ZHAO, N.; SONG, W.; SONG, G.; CHEN, G.; JIANG, L.; JIANG, C.; CHEN, R.; CHEN, B. Visibility, air quality and daily mortality in Shanghai, China. **Science of the Total Environment**, Vol. 407, pp. 3295–3300, 2009.

HUNT, J.C.R.; WRAY, A.A.; MOIN, P. Eddies, streams and convergence zones in turbulent flows. **Center for Turbulent Research. Proceedings of the Summer Program 1988**.

HYSLOP, N.P. Impaired visibility: the air pollution people see. **Atmospheric Environment**. v. 43, p. 182-195, 2009.

IVERSEN, J.D., WHITE, B.R. Saltation threshold on Earth, Mars, and Venus. **Sedimentology**, 29: 111–119, 1982.

JACQUEMIN *et al.* Annoyance due to air pollution in Europe. **International Journal of Epidemiology**. v. 36, p. 809–820, 2007.

JENSEN, N. O. **Dry deposition and resuspension of particulate matter in city environments**. Ris0 National Laboratory, DK-4000 Roskilde, Denmark. RIS0-M-2438, June 1984 .

JIANG, X.; LAI, C.H. **Numerical Techniques for Direct and Large-Eddy Simulations**. 1a Ed. CRC Press. 2009.

JIMÉNEZ, J. The contributions of N.A. Kolmogorov to the theory of turbulence. *Arbor CLXXVIII*, 704, p. 589-606. 2004.

JIN, H.H.; FAN, J.R.; ZENG, M.J.; CEN, K.F. Large eddy simulation of inhaled particle deposition within the human upper respiratory tract. *Aerosol Science*, Vol. 38, pp. 257-268, 2007.

KIM, S. E. "Large eddy simulation using unstructured meshes and dynamic subgrid-scale turbulence models". **Technical Report AIAA-2004-2548. 34th Fluid Dynamics Conference and Exhibit American Institute of Aeronautics and Astronautics**. Junho, 2004.

KIM, W.W.; MENON, S. "Application of the localized dynamic subgrid-scale model to turbulent wallbounded flows". **Technical Report AIAA-97-0210. 35th Aerospace Sciences Meeting, Reno, NV American Institute of Aeronautics and Astronautics. January, 1997**.

KONDO, K.; MURAKAMI, S.; MOCHIDA, A. Generation of Velocity fluctuations for inflow boundary condition of LES. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. Vol. 67 & 68, p. 51-64, 1997.

KRAICHNAN, R. H. Diffusion by a Random Velocity Field. **Phys. Fluids**, 13, 22, 1970.

LANCASTER, N.; NICKLING, W.G.; MCKENNA, N.C.K.; WYATT, V. E. Sediment flux and airflow on the stoss slope of a barchan dune. **Geomorphology**. Vol. 17, pp. 55-62, 1996.

LENGWEILER, P. **Modelling Deposition and Resuspension of Particles on and from Surfaces**. Ph.D. Thesis, 2000. Swiss Fédéral, Institute of Technology Zürich. (Speciality: Technical Science). Switzerland.

LEONARD, A. Energy cascade in large eddy simulation of turbulent fluid flow. **Advanced Geophysics**. Vol. 18. pp. 237-248, 1974.

LI, X.; DUNN, P.F.; BRACH, R.M. Experimental and Numerical Studies of Microsphere Oblique Impact with Planar Surfaces. **Journal of Aerosol Science**, Vol. 31, pp. 583-594, 2000.

LILLY, D.K. A proposed modification of the Germano subgrid-scale Closure Method. **Phys. Fluids A** 4(3), pp. 633-635, 1992.

- LIM, C. H.; THOMAS, T. G.; CASTRO, I. P. **Flow around a cube in a Turbulent Boundary Layer: LES and Experiment**. School of Engineering Sciences, University of Southampton, UK. 2008.
- LUDWIEG, H.; TILLMANN, W. Investigation of the wall-shearing stress in turbulent boundary layer. **In NACA Technical Memorandum**, 1950.
- MARCOLOVATTO (20120). Disponível em:
<http://marcolovatto.blogspot.com.br/2012/11/numero-de-courant-cfl-e-condicao-cfl.html>.
 Acesso em: 30 set. 2014.
- MATSUMOTO, S.; SAITO, S. Monte Carlo Simulation of Horizontal Pneumatic Conveying Based on the Rough Wall Model', **Journal of Chemical Engineering of Japan**, Vol. 3, pp. 223-230, 1970.
- McKENNA, C. N.; LANCASTER, T. N.; NICKLING, W.G. Relations between dune morphology, air flow, and sediment fluxon reversing dunes, Silver Peak, Nevada. **Sedimentology**. v. 44, pp. 1103-1113, 1997.
- MENTER, F. R. "Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications". AIAA. Journal. 32(8). 1598–1605. August 1994.
- MINIER, J. P.; PEIRANO, E. The pdf approach to turbulent polydispersed two-phase flows. **Physics Reports**, Vol. 352, pp. 1-214, 2001.
- MORSI, S.A.; ALEXANDER, A. J. An Investigation of Particle Trajectories in Two-Phase Flow Systems. **Journal of Fluid Mechanics**. 55(2). p. 193-208, 1972.
- MRI REPORT. Wind tunnel studies of BACM Effectiveness – Final Test Report. September, 1995. Disponível em: <http://www.azdeq.gov/environ/air/assessment/download/wind.pdf>.
 Acesso em: 13 abr. 2014.
- MURAKAMI, S. Comparison of Various Turbulence Models Applied to a Bluff Body. **Journal of Wind Eng. Ind. Aero.**, v.46-47, p.21-36, 1993.
- MURAKAMI, S. MOCHIDA, A. Three-dimensional numerical simulation of air flow around a cubic model by means of Large Eddy Simulation. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. v. 25, p. 291-305, 1987.
- MURAKAMI, S.; IIZUKA, S. CFD analysis of turbulent flow past square cylinder using dynamic LES. **Journal of Fluids and Structures**. v. 13, p. 1097-1112, 1999.
- NEZU, I.; TOMINAGA, A. Suirigaku. **Asakura Shoten**. pp.130-133, 2000.
- NICHOLSON, K.W. A review of particle resuspension. **Atmospheric Environment**. Vol. 22, No 12, pp. 2639-2651, 1988.
- NICOU, F.; DUCROS, F. Subgrid scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. **Flow, Turbulence and Combustion**, v. 62, p. 183-200, 1999.
- NIKOLOPOULOU, M.; KLEISSL, J.; LINDEN, P. F.; LYKOUKIS, S. Pedestrians' perception of environmental stimuli through field surveys: Focus on particulate pollution. **Science of the Total Environment**. Vol. 409, pp. 2493-2502, 2011.
- ONDER, S.; DURSUN, S. Air borne heavy metal pollution of Cedruslibani (A. Rich.) in the city centre of Konya (Turkey). **Atmospheric Environment**, Vol. 40 (6), pp. 1122-1133, 2006.
- PARKER, S.T., KINNERSLEY, R.P. A computational and wind tunnel study of particle dry deposition in complex topology. **Atmos. Environ.** v. 38, p. 3867–3878, 2004.

- PARKINSON, G. V.; JANDALI, T. A wake source model for bluff body potential flow. **Journal of Fluid Mechanics**. Vol. 40. pp. 577-594, 1970.
- PARSONS, D.R.; WALKER I. J.; WIGGS, G.F.S. Numerical modelling of flow structures over idealized transverse aeolian dunes of varying geometry. **Geomorphology**. v. 59, pp. 149–164, 2004.
- PIOMELLI, U. Wall-layer models for large-eddy simulations. **Progress in Aerospace Sciences**. v. 44, p.437–446, 2008.
- PIOMELLI, U.; BALARAS, E. Wall-layer models for large-eddy simulations. **Annu Rev. Fluid Mech**, v. 34, p. 349–74, 2002.
- POPE, C.A.; DOCKERY, D. W. Health effects of fine particulate air pollution: lines that connect. **J. Air Waste Manage Assoc**. Vol. 56 (6), P. 709–742, 2006.
- PUTTOCK, J. S.; HUNT, J. C. R. Turbulent diffusion from sources near obstacles with separated wakes – Part I. An eddy diffusivity model. **Atmospheric Environment**. Vol. 13. pp. 1-13, 1979.
- RAMAPRIAN, B.R.; PATEL, V.; SASTRY, M. **Turbulent wake development behind streamlines bodies**. Technical Report IIHR Report No. 231, Iowa Institute of Hidraulic Research. The University of IOWA, 1981.
- RIETH, M.; PROCH, F.; STEIN, O.T.; PETTIT, M.W.A.; KEMPF, A.M. Comparision of the Sigma and Smagorinsky LES Models for Grid Generated Turbulence and a Channel Flow. *Computer & Fluids*, doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2014.04.018>. 2014.
- ROBERTS, S. Interactions between particulate air pollution and temperature in air pollution mortality time series studies. **Environmental Research**. v. 96, p. 328–337, 2004.
- RONEY, J. A.; WHITE, B. R. Comparison of a two-dimensional numerical dust transport model with experimental dust emissions from soil surfaces in a wind tunnel. **Atmospheric Environment**. 44 (2010) 512 – 522.
- ROSARIO, N. E.; YAMASOE, M. A.; BRINDLEY, H.; ECK, T. F.; SCHAFER, J., Downwelling solar irradiance in the biomass burning region of the southern Amazon: Dependence on aerosol intensive optical properties and role of water vapor, **J. Geophys. Res.**, 116, D18304, 2011.
- SADA, K; SATO, A. Numerical calculation of flow and stack-gas concentration fluctuation around a cubical building. **Atmospheric Environment**, v. 36, n. 35, p. 5527-5534, 2002.
- SALIM, S. M.; BUCCOLIERI, R.; CHAN, A. & DI SABATINO, S. Numerical simulation of atmospheric pollutant dispersion in an urban street canyon: Comparison between RANS and LES. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics** v99, n2-3, p103—113, 2011.
- SANTOS, J. M.; REIS JR, N. C.; GOULART, E. V.; MAVROIDS, I. Numerical simulation of flow and dispersion around an isolated cubical building: The effect of the atmospheric stratification. *Atmospheric Environment*, 43(34):5484 – 5492, 2009.
- SCHLICHTING, H. **Boundary Layer Theory**. McGraw-Hill Book Company, 1979.
- SCHMIDT, S.; THIELE, F. Comparison of numerical methods applied to the flow over wall-mounted cubes. **International Journal of Heat and Fluid Flow**. v. 23, p. 330–339, 2002.
- SCHUMANN, U. Subgrid Scale Models for finite difference simulations of Turbulent Flows in plan channels annuli. **Journal of Computational Physics**. Vol. 18, p. 376-404, 1975.

- SEGURA, J. C. **Predictive capabilities of particle-laden large eddy simulation**. PhD thesis, Department of Mechanical Engineering, Stanford University. California. USA, 2004.
- SEINFELD, J. H.; PANDIS, S. N. **Atmospheric Chemistry and Physics – From Air Pollution to Climate Change**. John Wiley & Sons, Inc. 2^a Ed. 2006. Hoboken. New Jersey.
- SHAO, Y. **Physics and modelling of wind erosion**. Atmospheric and Oceanographic Sciences Library, Vol. 37, 2a. Ed., 2008.
- SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with primitive equations – the basic equations. **Monthly Weather Review**. Vol. 91. pp. 99-164, 1963.
- SMIRNOV, A.; SHI, S.; CELIK, S. Random flow generation technique for large eddy simulations and particle-dynamics modeling. **Journal of Fluids Engineering**, v. 123, p.359-171, 2001.
- SOMMERFELD, M. Modelling of Particle-Wall Collisions in Confined Gas-Particle Flows. **International Journal of Multiphase Flow**, Vol.18, pp. 905-926, 1992.
- SOMMERFELD, M.; HUBER, N. Experimental Analysis and Modelling of Particle-Wall Collisions', **International Journal of Multiphase Flow**, Vol. 25, pp. 1457-1489, 1999.
- SONNTAG, R. E.; BORGNAGE, C. **Fundamentos da Termodinâmica – Série van Wylen**. 8^a Ed. Editora Edgard Blucher, University of Michigan, 2013.
- STENLUND, T., LIDÉN, E., ANDERSSON, K., GARVILL, J., NORDIN, S. Annoyance and health symptoms and their influencing factors: A population-based air pollution intervention study. **Public Health** 123, 339-345, 2009.
- TABOR, G.R., BABA-AHMADI, M.H. Inlet conditions for large eddy simulation: A review. **Computers & Fluids**. 39 (2010) 553–567.
- TAIN, Z. **Numerical Modelling of Turbulent Gas-Particle Flow and Its Applications Flow and Dispersion around isolated buildings**. PhD thesis, School of Aerospace, Manufacturing & Mechanical Engineering, RMIT University, 174 p., 2006.
- TAINIO, M.; TUOMISTO, J. T.; PEKKANEN, J.; KARVOSENOJA ,N.; KUPIAINEN, K.; PORVARI, P.; SOFIEV, M.; KARPPINEN, A.; KANGAS, L.; KUKKONEN, J. Uncertainty in health risks due to anthropogenic primary fine particulate matter from different source types in Finland. **Atmospheric Environment**. Vol. 44, p. 2125-2132, 2010.
- TALBOT, L.; CHENG, R. K.; SCHEFER, R. W.; WILLIS, D. R. Thermophoresis of Particles in a Heated Boundary Layer. **Journal of Fluid Mechanics**. Vol. 101. Issue 04. 1980, pp. 737-758.
- TANIÈRE, A.; OESTERLÉ, B.; MONNIER, J.C. On the behaviour of solid particles in a horizontal boundary layer with turbulence and saltation effects. **Exp. Fluids**. v. 23(6), p. 463-471, 1997.
- TOMINAGA, Y.; STATHOPOULOS, T. Numerical simulation of dispersion around an isolated cubic building: Model evaluation of RANS and LES. **Building and Environment**. v. 45, p. 2231-2239, 2010.
- TOMINAGA, Y.; STATHOPOULOS, T. CFD Modeling of Pollution Dispersion in Building Array: Evaluation of turbulent scalar flux modeling in RANS model using LES results. **J. Wind Eng. Ind. Aerodyn**. v. 104–106, p. 484–491, 2012.

TORAÑO, J. A.; TORNO, S.; DIEGO, I.; MENENDEZ, M.; GENT, M. Dust Emission calculations in open storage piles protected by means of barriers, CFD and experimental tests. **Environ Fluid Mech**, v. 9, p. 493-507, 2009.

TORAÑO, J.A.; RODRIGUEZ, R.; DIEGO, I.; RIVAS, J.M.; PELEGRY, A. Influence of the pile shape on wind erosion CFD emission simulation. **Applied Mathematical Modelling**. v. 31, p. 2487–2502, 2007.

TSIRKUNOV, Y.M.; PANFILOV, S.V. Modeling of particle-wall interaction in two-phase flows at moderate and high particle impact velocity. **In: the 3rd International Conference on Multiphase Flow**, ICMF 98, Lyon, France, 1998.

TURPIN, C. **Amélioration des modèles de quantification des émissions particulaires diffuses liées à l'érosion éolienne de tas de stockage de matières granulaires sur sites industriels**. PhD thesis, University of Valenciennes, França, 2010.

TURPIN, C.; HARION, J.L. Effect of the topography of an industrial site on dust emissions from open storage yards. **Environmental Fluid Mechanics**, 2010.

TURPIN, C; HARION, J. L. Numerical modeling of flow structures over various flat-topped stockpiles height: Implications on dust emissions. **Atmospheric Environment**, v. 43, p. 5579–5587, 2009.

TUTAR, M.; OGUZ, G. Large eddy simulation of wind flow around parallel buildings with varying configurations. **Fluid Dynamics Research**. v. 31, p. 289-315, 2002.

USEPA (2006). Basic Information about Particle Matter. Disponível em: <http://www.epa.gov/pm/basic.html>. Acesso em: 29 out. 2013.

USEPA (2006a). **Aggregate Handling And Storage Piles**. AP-42, 5ª Ed. Vol I. Chap. 13.2.4. Disponível em: <http://www.epa.gov/ttn/chief/ap42/ch13/final/c13s0204.pdf>. Acesso em: 7 jun. 2011.

USEPA (2006b). **Miscellaneous Sources Industrial Wind Erosion**. AP-42, 5ª Ed. Vol I. Chap. 13.2.5. Disponível em: <http://www.epa.gov/ttn/chief/ap42/ch13/final/c13s0205.pdf>. Acesso em: 7 jun. 2011.

VAN DRIEST, E.R. On turbulent flow near a wall. **J.Aero.Sci**. v. 23, p. 1007-1011, 1956.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics. The Finite Volume Method**. Ed. Pearson Education Limited. 2a. Ed. 2007.

WANG, B.; ZHANG, H.Q.; WANG, X.L. Large Eddy Simulation of particle response to turbulence along its trajectory in a backward-facing step turbulent flow. **International Journal of Heat and Mass Transfer**. v. 49, p-415-420, 2006.

WEICKERT, M.; TEIKE, G.; SCHMID, O.; SOMMERFELD, M. Investigation of the LES WALE turbulence model within the lattice Boltzmann framework. **Computers and Mathematics with Applications**, Vol. 59, pp. 2200-2214, 2010.

WEIPING, D.; DAVIDSON, C.I.; ETYEMEZHIAN, V.; ZUFALL, M. Wind tunnel studies of particle transport and deposition in a turbulent. **Aerosol Science and Technology**, 35: 5, 887-898, 2001.

WHELAN, P.M. **Introduction to the mole in the teaching of ideal and real gases**. Physics Education. Vol. 12. pg. 279-284, 1977.

WHO (2005). **Air Quality Guidelines - Global Update 2005 - Regional Office for Europe**. Disponível em: http://www.euro.who.int/_data/assets/pdf_file/0005/78638/E90038.pdf. Acesso em: 30 jul. 2010.

WILCOX, D. C. **Turbulence Modeling for CFD**. Ed. DCW Industries. 3a. Ed. California, 2006. USA.

WILSON, I.G. Ergs. **Sedimentary Geology**, 10 (1973): 77-106.

WU, D.; TIE, X.; CHENGCAI, L.; ZHUMING, Y.; LAU, A. K. H.; HUANG, J.; DENG, X.; BI, X. An extremely low visibility event over Guangzhou region: a study case. **Atmospheric Environment**, Vol. 39, pp. 6568–6577, 2005.

YUDINE, M.I. Physical Considerations on heavy-particle diffusion. **Main Geophysical Observatory**. Leningrado, U.R.S.S. 1959.

ZHANG, W.; KANG, J. H.; LEE, S.J. **Tracking of saltating sand trajectories over a flat surface embedded in an atmospheric boundary layer**. *Geomorphology* v. 86, p. 320–331. 2007.

ZHANG, W.; WANG, Y.; LEE, S. J. Two-phase measurements of wind and saltating in an atmospheric boundary layer. **Geomorphology**. v. 88(1-2), p. 109-119, 2007.

ZHAO, H.; CASTLE, G.S.; INCULET, I.I.; BAILEY, A. G. Bipolar charging of poly-disperse polymer powders in fluidized beds. **IEEE Trans. Ind. Appl.**, 39:612, 2003.

ANEXO I – Demonstração da variação da temperatura na atmosfera neutra

Esse anexo tem como objetivo demonstrar as equações que regem uma condição de estabilidade neutra e conceituar temperatura potencial.

A variação da temperatura com a altitude na atmosfera é a variável chave na determinação do grau no qual os materiais se misturam verticalmente. O estudo do perfil da temperatura na atmosfera utiliza o conceito de uma parcela de ar: uma hipotética massa de ar que pode se deforma à medida que se move na atmosfera, mas permanece como uma única unidade sem troca de massa com o seu entorno. Quando se assume que a parcela de ar não troca calor com sua vizinhança, essa parcela de ar é denominada adiabática (SEINFELD & PANDIS, 2006).

Vamos assumir que a atmosfera se encontra em um estado na qual as parcelas de ar adiabáticas que movem verticalmente estão em equilíbrio com seu entorno. Essa atmosfera em estado de equilíbrio é definida como neutra, e o perfil de temperatura correspondente é utilizado como perfil de referência para a discussão sobre estabilidade atmosférica. Esse estado neutro corresponde aquele em que a parcela de ar se move de sua posição original onde estava em equilíbrio para uma nova posição, onde também ficará também em equilíbrio.

Assim, é possível calcular o perfil de temperatura $T(z)$ que corresponde a uma atmosfera neutra, considerando as seguintes hipóteses definições: *i)* atmosfera – coluna estacionária de ar no campo gravitacional; *ii)* ar considerado um gás ideal seco; *iii)* sem ação de forças de inércia e de atrito (equação hidrostática).

Se uma parcela de ar de massa m se move infinitesimalmente na atmosfera, a troca de energia interna dU satisfaz a 1ª lei da termodinâmica (SONNTAG & BORGNAGE, 2013), também chamada de Lei da Conservação da Energia, que expressa a variação da energia interna de um gás como função do calor transferido e do trabalho produzido:

$$dU = dQ + dW \quad \text{Eq. 1}$$

Sendo dQ a variação do calor transferido e dW a variação do trabalho realizado pelo meio sobre a parcela de ar observado.

Para a formulação serão necessárias outras relações, como a variação do trabalho a uma pressão constante, segundo a Eq. 2:

$$dW = -pdV \quad \text{Eq. 2}$$

sendo p a pressão e dV a variação de volume.

Uma vez que a parcela do ar é assumida em estado adiabático, a variação do calor transferido passa a ser zero (Eq. 3):

$$dQ = 0 \quad \text{Eq. 3}$$

A mudança da energia interna é definida na Eq. 4:

$$dU = mc_{v,ar}dT \quad \text{Eq. 4}$$

sendo dU a variação da energia interna, m é a massa de ar, $c_{v,ar}$ o calor específico do ar a volume constante e dT a variação de temperatura.

Substituindo-se Eq. 2, Eq. 3 e Eq. 4, tem-se a Eq. 5, que relaciona a variação de temperatura à variação de volume:

$$mc_{v,ar}dT = -pdV \quad \text{Eq. 5}$$

Na leitura da Eq. 5 observa-se que a mudança na energia devido ao trabalho em expansão é igual à redução de energia devido à diminuição de temperatura. Para trabalhar com o termo dV da Eq. 5 em função de temperatura e pressão, voltamos a utilizar a Equação dos gases ideais:

$$pV = \frac{mRT}{M_{ar}} \quad \text{Eq. 6}$$

sendo M_{ar} a massa molecular média do ar.

Isolando o termo de volume da Eq. 6 e utilizando a propriedade de derivadas em ambos os lados, chega-se a Eq. 7:

$$d(pV) = \frac{mR}{M_{ar}}dT \quad \text{Eq. 7}$$

Aplicando a propriedade de derivada do produto no lado esquerdo da Eq. 7, tem-se:

$$p(dV) + V(dp) = \frac{mR}{M_{ar}}dT \quad \text{Eq. 8}$$

Com o valor de V encontrado na Eq. 6, e substituindo na Eq. 8:

$$p(dV) = \frac{mR}{M_{ar}}dT - \frac{mRT}{pM_{ar}}(dp) \quad \text{Eq. 9}$$

Substituindo a Eq. 5 na Eq. 9, resulta em:

$$mc_{v,ar}dT = \frac{mRT}{pM_{ar}}(dp) - \frac{mR}{M_{ar}}dT \quad \text{Eq. 10}$$

Rearranjando a Eq. 10, dividindo ambos os lados por dz :

$$\left(mc_{v,ar} + \frac{mR}{M_{ar}}\right)\frac{dT}{dz} = \frac{mRT}{pM_{ar}}\left(\frac{dp}{dz}\right) \quad \text{Eq. 11}$$

Nesse momento é necessário explicitar também a relação da taxa de variação da Pressão com a Altitude. Inicialmente aplica-se a derivada na equação governante de pressão estática na atmosfera. Assim, tem-se um volume elementar na atmosfera de área horizontal dA entre duas alturas, z e $z+dz$, conforme mostra a Figura 1:

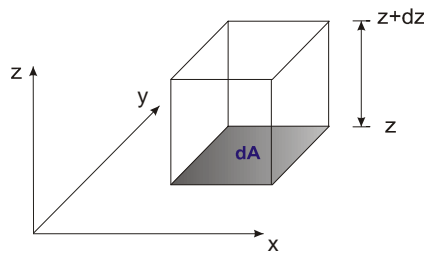


Figura 1 – Volume de Controle de área dA com altura entre z e $z+dz$

Logo, a pressão exercida na massa de ar no volume mencionado é descrito pela Eq. 12, equivalente ao peso da coluna de ar acima da área dA :

$$p = -\rho g dA dz \quad \text{Eq. 12}$$

Dividindo-se a Eq. 12 por dz , e fazendo $dz \rightarrow 0$, chega-se à Eq. 13:

$$\frac{dp(z)}{dz} = -\rho(z)g \quad \text{Eq. 13}$$

Na Eq. 13, $\rho(z)$ é a densidade mássica do ar na altura z e g é a aceleração da gravidade. Pela lei dos gases ideais:

$$\rho(z) = -\frac{M_{ar}p(z)}{RT(z)} \quad \text{Eq. 14}$$

Rearranjando a Eq. 13 em conjunto com a Eq. 14:

$$\frac{dp(z)}{dz} = -\frac{M_{ar}gp(z)}{RT(z)} \quad \text{Eq. 15}$$

Substituindo o termo da derivada de pressão, chegando à Eq. 16:

$$\frac{dt}{dz} = - \frac{g}{c_{v,ar} + \frac{R}{M_{ar}}} \quad \text{Eq. 16}$$

Nesse ponto será necessária uma relação entre o calor específico a volume constante em relação ao calor específico a pressão constante, chamada Equação de Mayer (WHELAN, 1977), conforme Eq. 17:

$$c_{v,ar} + \frac{R}{M_{ar}} = c_{p,ar} \quad \text{Eq. 17}$$

Finalmente, a temperatura varia em função da altura segundo a na Eq. 18, temos:

$$\frac{dt}{dz} = - \frac{g}{c_{p,ar}} \quad \text{Eq. 18}$$

Conclui-se, assim, que o gradiente de temperatura vertical para uma atmosfera neutra é igual a uma constante. O calor específico a pressão constante do ar é $c_{p,ar} = 1005 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ e $g/c_{p,ar} = 0,976 \text{ K/m}$. Esse valor se refere ao ar livre de água, denominado razão de intervalo adiabático seco, representado por Γ . Se a temperatura na superfície é T_0 , então, por integração da Eq. 18, o perfil de temperatura será $T = T_0 - \Gamma z$.

Um conceito importante que envolve a atmosfera neutra é o de temperatura potencial. Assumindo que uma parcela de ar em algum lugar na atmosfera tem uma temperatura T e pressão p e está inicialmente em equilíbrio (mesma T e p) com a atmosfera no entorno. Se essa parcela de ar seco é movida e adiabaticamente da superfície até a pressão $p_0 = 1 \text{ atm}$, então ela terá uma temperatura denominada temperatura potencial (θ). A temperatura potencial pode ser calculada por meio da integração da Eq. 11 das condições iniciais (T, p) ao estado final (θ, p_0):

$$\theta = T \left(\frac{p_0}{p} \right)^{R/c_p M_{ar}} \quad \text{Eq. 19}$$

Não importa onde o pacote de ar começa nesta atmosfera, ele sempre vai atingir a mesma temperatura quando trazido para a superfície à pressão p_0 . Em outras palavras, a temperatura potencial da parcela de ar não mudará durante seu movimento e sempre será igual a zero. O equilíbrio da parcela de ar com o ambiente no entorno significa que a atmosfera neutra tem a mesma temperatura potencial em todas as alturas z e, assim, $d\theta/dz = 0$. Ao plotar um

gráfico de altura x temperatura potencial para atmosfera neutra (adiabática) terão como resultado linhas verticais em $\theta = T_0$.

Os resultados podem ser demonstrados matematicamente por diferenciação da Eq. 18 em relação à z:

$$\frac{1}{\theta} \frac{d\theta}{dz} = \frac{1}{T} \frac{dT}{dz} - \frac{R}{c_{p,ar} M_{ar}} \frac{1}{p} \frac{dp}{dz} \quad \text{Eq. 20}$$

Após inserir Eq. 15 (dp/dz) e observando que $\Gamma = g/c_{p,ar}$, é apresentada a Eq. 19:

$$\frac{1}{\theta} \frac{d\theta}{dz} = \frac{1}{T} \left(\frac{dT}{dz} + \Gamma \right) \quad \text{Eq. 21}$$

Mas em atmosfera neutra, $dT/dz = -\Gamma$. Com isso, $d\theta/dz = 0$. Também θ é similar em magnitude a T (SANTOS, 2000). Assim, é possível escrever:

$$\frac{d\theta}{dz} = \frac{dT}{dz} + \Gamma \quad \text{Eq. 22}$$

e

$$\theta = T + \Gamma z \quad \text{Eq. 23}$$

Conclusão: Esse anexo teve como objetivo analisar o significado da condição de estabilidade neutra utilizada nesse trabalho, demonstrando a formulação necessária para dar suporte ao conceito que envolve a definição de temperatura potencial, e que na condição de estabilidade neutra não há variação da temperatura potencial com a altura ($d\theta/dz = 0$).

ANEXO II – Detalhe das sub-rotinas de injeção de partículas na superfície da pilha

1

Inicializa Variáveis e Constantes

Variável	Descrição	Valor inicial
tSeg	Entrada de dados do tempo inicial da simulação	Depende do usuário
quantSeg	Quantidade de segundos utilizada na geração do arquivo de saída	Depende do usuário
a1	Valor da 1ª constante modelo USEPA modificado	829,3
a2	Valor da 2ª constante modelo USEPA modificado	0,339
b1, b2, c1, c2	Valor das constantes do modelo USEPA modificado (valores específicos para cada Iso-superfície)	Conforme Tabela 4-6
tPav	Tempo de Pavimento [min.]	Calculado
quantSup	Quantidade de Iso-superfícies	8
percPartErod	Percentual de partículas erodíveis	80
quantTimeSteps	Quantidade de passos de tempo utilizados no arquivo de perfis gerados como entrada no Fluent (Fluent Inc. 2013)	60000
velVento	Velocidade da rajada [ms^{-1}]	8
masPart	Massa da partícula	1.3E-9
usr	Relação us/ur que caracteriza as iso-superfícies da pilha	Conforme Tabela 4-5
velFricLimAreia	Velocidade de Fricção Limite da partícula (areia) [ms^{-1}]	0,25
areaIso	Área das Iso-superfícies utilizadas na simulação [m^2]	usr_035=0,009344853; usr_045=0,00966264; usr_055=0,01036087; usr_065=0,009804568; usr_075=0,009468441; usr_085=0,008463928; usr_095=0,005753571; usr_105=0,003102429;
menorFlMassa	Menor fluxo de massa por unidade de área para que haja pavimento [$\text{g}/\text{min}.\text{m}^2$]	0,01
funcaoDec	Função de decaimento – exponencial que representa o decaimento do fluxo de massa	Calculado
inletFM	Fluxo de massa da partícula utilizado no arquivo de perfis gerados como entrada no Fluent (Fluent Inc. 2013)	Calculado
quantPart	Quantidade de partículas injetadas	Calculado
massaEmit	Massa emitida por passo de tempo	Calculado

Figura I-1 – Lista das principais variáveis

2

Calcula Velocidade de Fricção

FOR I=1,quantSup

velFric[i]=0.1*usr[i]/velVento //Eq. 3-131

END

3

Calcula Tempo Pavimento

tPav=(-1/a2)*ln(menorFlMassa/a1) // Eq. 4-6

4 **Calcula Função Decaimento**

```

FOR j=1, quantTimeSteps
  tSeg=0,001
  tMinPost=(tSeg+0,001)/60
  tMinAtual=(tSeg)/60
  funcaoDec[j]=exp(-a2*tMinAtual) -exp(-a2*tMinPost))/(1-exp(-a2*tPav)) //Eq. 4-5 (c)
  tSeg=tSeg+0,001
END

```

5 **Calcula Fluxo de Massa**

```

tSeg=0,001
quantTimeSteps=(int) quantSeg*1000;
FOR i=1,quantSup //Quantidade de iso-superfícies
  FOR j=1,quantTimeSteps //Quantidade de passos de tempo
    tMinPost=(tSeg+0,001)/60
    tMinAtual=(tSeg)/60
    //Eq. 3-134:
    inletFM[i][j]=0,001*((b1[i]*(percPartErod^b2)*((velFric[i] - velFrLimAreia)^2)))+c1[i]*
    ((percPartErod^c2[i]))*(velFric[i]-velFrLimAreia))*areaIso[i]*funcaoDec[j]/(tMinPost-tMinAtual)
  END
END
END

```

6 **Calcula Quantidade Partículas Injeção**

```

tSeg=0,001;
FOR i=1,quantSup
  FOR j=1,quantTimeStep
    tMinPost=(tSeg+0,001)/60;
    tMinAtual=(tSeg)/60;
    massaEmit[i][j]=inletFM[i][j]*(tMinPost-tMinAtual);
    quantPart[i][j]= round(massaEmit[i][j]/masPart);
  END
END
END

```

7 **Gera Arquivo Partículas Injeção**

```

FOR pos = 1, quantSup
  defineNomeArq(pos); //Um arquivo para cada iso-superfície
  k = tSeg;
  FOR j = 1, quantTimeSteps
    numFinal = trataNumero(k); //Prepara passo de tempo para gravação
    out.println(numFinal); //Grava primeira coluna
    k += 0.001;
  END
  FOR j=1, quantTimeSteps
    out.println(inletFM[pos][j]); //Grava segunda coluna
  END
END
END

```


ANEXO III – Pós-processamento do arquivo de partículas para cálculo do perfil de velocidade e concentração

Lista de Variáveis

Variável	Significado	Valor inicial
quocienteX	Índice para contar a quantidade de partículas de acordo com a posição na direção X	Calculado
quocienteZ	Índice para contar a quantidade de partículas de acordo com a posição na direção Z	Calculado
mediaQtPart	Calcula a quantidade média de partículas da <i>strip</i>	Calculado
qtdStripXY	Conta a quantidade de <i>strips</i> no plano XY	Calculado
maiorQtPartXY	Maior quantidade de partículas no plano XY	Calculado
mVelMediaQt	Calcula velocidade média das partículas se localizam numa mesma <i>strip</i>	Calculado
TAMX	Quantidade de <i>strips</i> na direção X	400
TAMZ	Quantidade de <i>strips</i> na direção Z	1200
inFileP	Estrutura que contém o layout do arquivo gerado no Fluent: ResidenceTime – Tempo de residência da partícula XPosition – Posição X da partícula no domínio YPosition – Posição Y da partícula no domínio Zposition – Posição Z da partícula no domínio XVelocity – Velocidade da partícula na direção X do domínio YVelocity – Velocidade da partícula na direção Y do domínio ZVelocity – Velocidade da partícula na direção Z do domínio ParticleID – Número identificador da partícula no domínio VelocityMagnitude – Valor da velocidade da partícula	
velPart	Matriz de Velocidade média das partículas de cada <i>strip</i>	Calculado
faixaIniZ	Posição início da <i>strip</i> na direção Z	Calculado
faixaFimZ	Posição fim da <i>strip</i> na direção Z	Calculado
contPart	Matriz para contagem de partículas de cada <i>strip</i>	Calculado

1 Leitura Arquivo de Entrada

open file inFileP, status="old"

3 Geração das posições das *strips*

```
FOR j=-TAMX,TAMX //Direção X
  FOR k=0,1200 //Direção Z
    faixaIniZ(j,k)=k*0.0005
    faixaFimZ(j,k)=(k+1)*0.0005
  end
end
```

2 Inicializa Variáveis

```
FOR j=-TAMX,TAMX //Direção X
  FOR k=0,1200 ! Direção Z
    velPart(j,k)=0.0
    contPart(j,k)=0
  end
End
```

4

Gera Matriz velocidade e partículas

```

DO WHILE ! end(infileP)
  read infileP           // Leitura do arquivo de entrada
  if (XPosition>-2.0) and (XPosition <2.0)) //Verifica domínio utilizado para a strip
    posX=XPosition*2000-1
    posZ=ZPosition*2000-1
    quocienteX=INT(posX)
    quocienteZ=INT(posZ)
    contPart(quocienteX,quocienteZ)=contPart(quocienteX,quocienteZ)+1
    velPart(quocienteX,quocienteZ)=velPart(quocienteX,quocienteZ)+VelocityMagnitude
  end
end

```

5

Calcula Velocidade Média e Quantidade de Partículas e Grava arquivo de saída

```

FOR k=1,TAMZ
  maiorQtdPartXY=0
  FOR j=-TAMX,TAMX
    if (contPart(j,k).ne.0)
      qtdPartPlanoXY=qtdPartPlanoXY+contPart(j,k)
      velMedia=velMedia+velPart(j,k)
    end
    if (j.eq.TAMX) then
      if ((qtdStripXY.gt.0).and.(qtdPartPlanoXY.gt.0)) then
        qtdMediaPartXY=(qtdPartPlanoXY+10E-10)/qtdStripXY
        velMediaFinal=velMedia/qtdPartPlanoXY
        write (arqsaida) faixaIniZ(j,k), faixaFimZ(j,k), qtdMediaPartXY
        write (arqsaida) faixaIniZ(j,k), faixaFimZ(j,k), elMediaFinal
      end
    end
  end
end

```